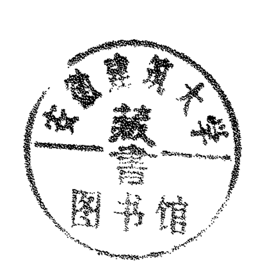
理论物理导论

程建春 编著



理论物理导论

程建春　编著



科 学 出 版 社
北　京

内 容 简 介

本书简要阐述了理论物理的重要概念、原理和方法. 选择内容适当、互相贯通，构成比较系统、全面的理论物理教学体系. 全书由经典力学、电动力学、量子力学、热力学和统计力学四大部分组成，每部分 6 章，共 24 章.

本书可供理工科非物理专业本科高年级学生和研究生作为教材和教学参考书，适合于材料科学、电子工程、化学理论、自动控制等需要较深物理知识的专业.

图书在版编目(CIP)数据

理论物理导论/程建春编著. —北京：科学出版社，2007

ISBN 978-7-03-018554-9

Ⅰ. 理…　Ⅱ. 程…　Ⅲ. 理论物理学-高等学校-教材　Ⅳ. O41

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 019865 号

责任编辑：胡　凯 / 责任校对：郑金红
责任印制：赵德静 / 封面设计：王　浩

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

双青印刷厂 印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销

*

2007 年 4 月第　一　版　开本：B5(720×1000)
2007 年 4 月第一次印刷　印张：32
印数：1—3 000　字数：613 000

定价：68.00 元

前　言

本书是为理工科非物理专业本科高年级学生和研究生编写的，适合材料科学、电子工程、理论化学、自动控制等需要较深物理知识的专业. 编写一年课程的理论物理教材的困难在于：理论物理内容实在太丰富了，它包括四大力学——经典力学、电动力学、量子力学、热力学和统计力学，而经典力学中又可以包括质点和质点组力学、弹性力学、流体力学和分析力学. 内容的选择是本书是否成功的关键.

本书虽名为《理论物理导论》，但通过在内容选择和方法讲述上下工夫，既基本保持了物理专业本科理论物理课程的水平，又适应了非物理专业的学时要求. 比如，在牛顿力学中，我们完全放弃了运动学的内容，引力场理论也完全放弃；在电动力学中，放弃了静电势求解方法的内容；在电磁波的散射方面，放弃了标量衍射理论，而代之以光子晶体理论；在统计力学中，基本放弃了非平衡态统计理论. 诸如此类.

编写本书的原则有下列五个方面.

1. 作为单独的课程，四大力学都已经有成熟和完整的体系，我们没有必要去建立新的课程体系. 因此本书完全按经典力学、电动力学、量子力学和热力学与统计力学四大部分来编写.

2. 本书包含了四大力学的基本内容，对新发展的理论和方法没有过多涉及，如量子干涉和重正化群等. 这主要是由本书的性质决定的，在导论性课程中，把基本的内容讲透、学透就可以了，没有必要用新的东西来点缀.

3. 四大力学不是完全独立的，而是相互交融的. 事实上，物理学的每一个分支都存在内在的联系. 之所以分成四大力学，应该理解为：这仅仅是为了讲述的方便. 就理论物理课程而言，Hamilton 力学是基础.

4. 理论物理与普通物理的主要区别不在于物理概念，而是理论物理更注重用数学方法表述物理概念，从基本原理出发，通过逻辑推理和数学推导，建立起整个物理学体系. 因此，本书不可能不涉及到数学推导，而且为了方便学习，推导过程尽量详细.

5. 通过学习本书，首先是要掌握整个理论物理的框架和体系，其次是了解各部分的组成，最后才是理解理论物理的数学和逻辑推理方法.

本书的出版得到南京大学“985 工程”的资助.

目　录

第一部分　经典力学

第1章　牛顿力学 …… 3

1.1　质点动力学:动量、角动量和动能定理 …… 3

1.2　保守力场、有心力和运动的稳定性 …… 8

1.3　质点组动力学:动量、角动量和位力定理 …… 12

1.4　非惯性参考系:惯性离心力和科里奥利力 …… 16

习　题 1 …… 21

第2章　刚体的定点运动 …… 24

2.1　刚体运动的描述:角速度矢量和 Euler 角 …… 24

2.2　惯量张量、转动惯量和转动动能 …… 28

2.3　刚体动力学方程:动量矩定理和 Euler 方程 …… 33

2.4　刚体的定点运动、动平衡的稳定性 …… 36

习　题 2 …… 40

第3章　弹性体中的场和波 …… 43

3.1　弹性体中的应变和应力张量 …… 43

3.2　弹性体的本构关系:几种特殊的弹性体 …… 47

3.3　弹性体的平衡、应力张量对称性和能量密度 …… 49

3.4　弹性体中的波、弹性算子的完备性和声子晶体 …… 52

习　题 3 …… 58

第4章　流体的运动 …… 60

4.1　流体中的应变、应力张量和本构方程 …… 60

4.2　动力学方程、守恒定律和流体中的波 …… 64

4.3　流体运动的相似律和 Reynolds 数 …… 69

4.4　流体的基本运动:涡旋、层流和湍流 …… 71

习　题 4 …… 77

第5章　Lagrange 力学 …… 80

5.1　虚功原理、d'Alembert 原理和约束反力 …… 80

5.2　Lagrange 方程和动力学问题中的约束反力 …… 85

5.3　保守力体系的 Lagrange 方程和广义能量守恒 …… 89

5.4 多自由度力学系统的微振动 …… 93
5.5 经典力学中的对称性和守恒定律 …… 97
习 题 5 …… 99
第 6 章 Hamilton 力学 …… 103
6.1 Hamilton 正则方程:循环坐标和能量积分 …… 103
6.2 Louville 定理、Poisson 括号和 Poisson 定理 …… 109
6.3 Hamilton 原理和弹性体的 Hamilton 原理 …… 112
6.4 正则变换:正则条件和 Poisson 括号的不变性 …… 115
习 题 6 …… 120

第二部分 电 动 力 学

第 7 章 电磁场的基本性质 …… 127
7.1 电磁现象的实验定律和平方反比律 …… 127
7.2 真空中电磁场的 Maxwell 方程组和位移电流 …… 134
7.3 介质中电磁场的 Maxwell 方程组和边界方程 …… 137
7.4 电磁场的守恒定律和场的能量密度 …… 141
习 题 7 …… 146
第 8 章 静电场和静磁场 …… 149
8.1 静电场的唯一性和相互作用能 …… 149
8.2 静磁场的唯一性和磁标量势 …… 155
8.3 多极展开和多极矩与外场的相互作用 …… 163
8.4 准静态场和场的扩散 …… 169
习 题 8 …… 171
第 9 章 电磁波的传播 …… 176
9.1 无限大均匀介质中的平面波和波的偏振 …… 176
9.2 电磁波在平面界面的反射和折射、全反射 …… 179
9.3 各向异性介质中的电磁波和双折射现象 …… 184
9.4 电磁波在等离子体中的传播和 Faraday 旋转效应 …… 186
9.5 波导中波的传播:相速度、群速度和截止频率 …… 189
习 题 9 …… 194
第 10 章 电磁波的辐射 …… 197
10.1 矢量势、标量势和规范不变性 …… 197
10.2 电偶极矩辐射、辐射场和角分布 …… 199
10.3 磁偶极矩辐射和电四极矩辐射 …… 203
10.4 运动电荷的辐射场与辐射阻尼 …… 206

习　题 10 …… 211
第 11 章　运动体系的电磁场和波 …… 215
11.1　Lorentz 变换和 Minkowski 空间 …… 215
11.2　Maxwell 方程组的协变形式和场的 Hamilton 函数 …… 220
11.3　电磁场的变换和电磁场的不变量 …… 225
11.4　粒子在电磁场中的运动和 Hamilton 函数 …… 228
习　题 11 …… 233
第 12 章　电磁波的散射和衍射 …… 236
12.1　微观带电粒子的散射和散射截面 …… 236
12.2　电磁波在宏观物体上的散射和 Born 近似 …… 239
12.3　电磁波在周期结构中的散射和光子晶体 …… 243
12.4　经典电动力学的适用范围和电子的惯性结构 …… 246
习　题 12 …… 250

第三部分　量 子 力 学

第 13 章　微观粒子的运动规律 …… 255
13.1　波函数的统计解释和 Schrödinger 方程 …… 255
13.2　一维定态问题：隧道效应和共振透射 …… 260
13.3　量子谐振子和谐振子的耦合 …… 265
13.4　有心力场中粒子的运动和氢原子的量子描述 …… 268
习　题 13 …… 273
第 14 章　力学量、算符和量子态 …… 276
14.1　力学量的平均值与算符运算 …… 276
14.2　Hilbert 空间上的 Hermite 算符和本征值问题 …… 279
14.3　力学量的测量、不确定关系和守恒量 …… 283
14.4　算符的矩阵形式、表象变换和密度矩阵 …… 290
14.5　量子体系的对称性和守恒量 …… 296
习　题 14 …… 298
第 15 章　近似方法 …… 300
15.1　非简并态微扰和电介质的极化 …… 300
15.2　简并态微扰和能级的强耦合 …… 303
15.3　变分方法和 Hartree 自洽场方法 …… 306
15.4　含时微扰：量子跃迁、光的吸收和激发 …… 311
习　题 15 …… 316
第 16 章　自旋和角动量 …… 319

16.1 电子的自旋算符和自旋波函数 …… 319
16.2 Pauli 方程和恒定磁场中电子的运动 …… 323
16.3 电子自旋与轨道角动量的耦合 …… 327
16.4 电子自旋与自旋的耦合 …… 332
习 题 16 …… 335
第 17 章 全同粒子和多体问题 …… 338
17.1 全同粒子系统的交换对称性和 Pauli 不相容原理 …… 338
17.2 He 原子:仲氦和正氦,交换能 …… 344
17.3 Hartree-Fock 方程和原子的壳层结构 …… 346
17.4 分子的振动和转动,正氢与仲氢 …… 350
习 题 17 …… 355
第 18 章 微观粒子的散射 …… 357
18.1 散射的描述方法:微分散射截面和散射振幅 …… 357
18.2 分波法:低能粒子的散射 …… 359
18.3 Born 近似:高能粒子的散射 …… 361
18.4 全同粒子的散射 …… 365
习 题 18 …… 367

第四部分 热力学和统计力学

第 19 章 宏观系统的热力学性质 …… 373
19.1 热力学系统的基本概念:平衡态和热力学过程 …… 373
19.2 热力学第一定律、Carnot 循环和焓 …… 378
19.3 热力学第二定律、Carnot 定理和熵增加定理 …… 381
19.4 不可逆过程、局部平衡和最小熵产生定理 …… 386
习 题 19 …… 391
第 20 章 热力学平衡条件、热力学函数和相变 …… 396
20.1 系统平衡条件,自由能、热力势和广势函数 …… 396
20.2 平衡的稳定性条件和临界态的基本特征 …… 401
20.3 热力学函数、热力学关系和最大功原理 …… 403
20.4 相变、临界现象和临界指数 …… 408
习 题 20 …… 413
第 21 章 准独立粒子系的经典统计 …… 417
21.1 平衡态的 Boltzmann 统计和等概率原理 …… 417
21.2 热力学函数与熵的微观解释 …… 420
21.3 双原子分子组成的理想气体和能量均分定理 …… 425

21.4　声子系统和固体的定容热容量 …… 428

21.5　二能级系统、负温度和核自旋 …… 431

习　题 21 …… 432

第 22 章　准独立粒子系的量子统计 …… 435

22.1　Fermi 统计和 Bose 统计 …… 435

22.2　量子统计中的热力学关系和熵 …… 437

22.3　金属中的自由电子:强简并电子气体 …… 441

22.4　电磁场的量子化、光子气体和 Bose-Einstein 凝聚 …… 444

习　题 22 …… 449

第 23 章　系综理论 …… 452

23.1　统计系综、各态经历假定和微正则分布 …… 452

23.2　正则分布、能量涨落和热力学关系 …… 455

23.3　巨正则分布、热力学关系和粒子数涨落 …… 460

23.4　T-p 分布与特征函数 …… 466

23.5　量子系综:密度矩阵 …… 468

习　题 23 …… 471

第 24 章　涨落、关联和局部细致平衡 …… 476

24.1　涨落的准热力学理论和乳光现象 …… 476

24.2　涨落的空间关联:Landau 唯象理论 …… 480

24.3　涨落的时间关联:Brown 运动 …… 484

24.4　准独立粒子系统的局部细致平衡 …… 487

习　题 24 …… 491

附录 A　矢量运算公式 …… 493

附录 B　张量运算公式 …… 496

附录 C　重要物理常量 …… 498

附录 D　英汉人名对照表 …… 499

第一部分
经 典 力 学



第1章　牛顿力学

经典力学是研究低速运动物体(即速度远小于光速($v \ll c$))和宏观粒子(即约化 Planck 常量可近似为零($\hbar \to 0$))的机械运动规律的力学. 它区别于研究粒子高速运动的狭义相对论(第 11 章)和研究微观粒子的量子理论(第 13 章). 牛顿力学是经典力学的基础,它是牛顿在前人的科学成果基础上以及通过自己长期的观察、实验和研究作出的科学总结. 一切宏观、低速运动物体的机械运动都可以用牛顿力学来解决,所以牛顿力学在经典力学中占有非常重要的地位.

本章主要介绍牛顿力学的基本内容,包括质点和质点组动力学、非惯性参考系中质点和质点组的动力学.

1.1　质点动力学:动量、角动量和动能定理

质点的动力学规律由牛顿运动三定律描述.

第一定律:任何物体(质点)如果没有受到其他物体的作用都将保持静止或匀速直线运动状态. 物体在不受其他物体作用时保持运动状态不变的这种性质叫**惯性**,是物质的一种固有属性,所以牛顿第一运动定律又叫**惯性定律**;

第二定律:当物体(质点)受到外力作用时,该物体所获得的加速度与外力成正比,与物体本身的质量成反比,加速度的方向与外力的方向一致,即

$$m\boldsymbol{a} = \boldsymbol{F} \tag{1.1.1}$$

其中 $\boldsymbol{F}$ 为质点上的**合外力**(包括主动力和约束反力),表示物体之间的相互作用,m 为质点的质量(称为**惯性质量**),是物体惯性大小的量度,$\boldsymbol{a}$ 为质点的加速度;

第三定律:当物体 A 对物体 B 有一个作用力 $\boldsymbol{F}$ 时,物体 B 对物体 A 也有一个反作用力,且为 $-\boldsymbol{F}$,即作用力与反作用力大小相等,但方向相反.

研究物体的运动时,首先要选定参考系. 在牛顿力学中,参考系不能任意选择. 牛顿运动三定律成立的参考系叫**惯性参考系**. 一个参考系是不是惯性参考系,依靠实验来决定. 实验表明:地球上的物体相对于地球的运动并不完全遵守牛顿运动定律,所以地球不是惯性参考系. 但是,如果把地球当惯性参考系,引起的偏差一般比较小,因此常常可以把地球看做近似程度相当好的惯性参考系. 但在要求精度很高的问题中,就不能把地球当作惯性参考系了. 人们发现,以太阳为原点,以指向任一恒星的直线为坐标轴形成的参考系,在这个参考系内,所观察到的许多天文现象与牛顿运动定律和万有引力定律推出的结论符合较好,因此这个参考系是一个精度

很高的惯性参考系.

力学相对性原理:一个相对于惯性参考系作匀速直线运动的参考系,它的内部所发生的一切力学过程,都不受这个参考系本身匀速直线运动的影响,或者说,不能通过任何力学实验来判断这样的参考系是静止还是作匀速直线运动.因此相对于惯性参考系作匀速直线运动的一切参考系都是惯性参考系.力学相对性原理又叫**伽利略相对性原理**.在狭义相对论中,Einstein 推广了伽利略相当性原理,称为 Einstein **相对性原理**,即一切惯性参考系对所有的物理过程(包括电磁过程)都是等价的.以后我们再讨论 Einstein 相对性原理.

下面对牛顿运动定律作一个简单的说明.

1. 方程(1.1.1)表明,加速度矢量与合力矢量的方向一致.这一结论表示:几个不同力作用的加速度按**线性方式叠加**,它是经典动力学的基础,称为力**的独立作用原理,即作用于质点的每一个力所产生的力学效应与其他力无关**.在经典力学中,由于质点的运动速度远小于光速,力的作用即时传递,每个力的作用完全独立、互不相干.

2. 不能认为方程(1.1.1)是力函数 $\boldsymbol{F}$ 的定义.事实上,我们用 m 来描述物体的惯性,用 $\boldsymbol{a}$ 来描述物体的运动,而用 $\boldsymbol{F}$ 来描述物体与周围其他物体的相互作用,它们三者之间存在着方程(1.1.1)的关系.

3. 当 $\boldsymbol{F}=0$ 时,$\boldsymbol{a}=0$,似乎可以得到第一定律的数学表达式,但第一定律的根本意义在于定义了物体的惯性,因此第一定律是独立于第二定律的.

4. 牛顿第三定律并不是自然界的一个普适定律,物理学中有些力并不符合这个定律.第三定律仅在下述情况才能适用:即一个物体作用于另一个物体上的力是沿着两物体的连线方向,这种力称为**有心力**或**中心力**.任何与相互作用物体速度有关的力,具有非中心力性质,第三定律不适用这种情况,例如运动电荷间的作用力不遵从第三定律.

力的基本类型:就我们现在的认识水平而言,自然界中存在的力基本可以分为四种,即万有引力、电磁力、弱力和强力.万有引力存在于一切质量不为零的物体之间,是人们最早认识的力(牛顿早在 17 世纪就建立了万有引力理论).电磁力是由静止或运动的电荷产生的力,它几乎是所有宏观力的根源,如各种材料的内部张力、弹性力、分子间的结合力、物体与物体之间的摩擦力,都是电磁相互作用形成的.弱力存在于基本粒子之间,其强度只有电磁力的 $1/10^{12}$,作用距离约为 10^{-15} cm,只相当于原子半径的 $1/10^{7}$.强力是核子之间的相互作用力,原子核稳定存在就是因为强相互作用力,它的作用距离约为 10^{-13} cm.因此,弱力和强力是短程相互作用,而万有引力和电磁力是长程相互作用.在本课程中,我们只考虑万有引力和电磁力,主要考虑电磁相互作用.

牛顿第二定律是一个二阶常微分方程,用位置矢量 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ 表示,即为

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},t) \tag{1.1.2}$$

注意:力 $\boldsymbol{F}$ 一般是位置矢量、速度矢量和时间的函数. 写成分量的形式,在三维直角坐标下即为

$$m\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2}=F_x(x,y,z;\dot{x},\dot{y},\dot{z};t) \tag{1.1.3}$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}t^2}=F_y(x,y,z;\dot{x},\dot{y},\dot{z};t) \tag{1.1.4}$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2 z}{\mathrm{d}t^2}=F_z(x,y,z;\dot{x},\dot{y},\dot{z};t) \tag{1.1.5}$$

以上三个方程都是二阶常微分方程,有 6 个积分常数,它们由粒子的初始位置和初始速度(称为初始条件)决定. 注意:初始速度给定了粒子的运动趋向,而初始位置反映了粒子的历史,二者完全决定了粒子 t 时刻的运动轨道.

如果质点受到某种约束,例如被限制在某曲线或曲面上运动,则质点为非自由质点. 此时,该曲线或曲面称为**约束**,而该曲线或曲面的方程称为约束方程. 对非自由质点的运动,一般是将约束去除而代之以**约束反作用力**(简称**约束反力**),从而把它看成是自由质点. 约束反力一般是未知的,与普通力不同,它不完全取决于约束本身,而与作用在质点上的其他力以及质点的运动状态等有关,而且单靠约束反力本身,并不能引起质点的任何运动. 所以称约束反力为**被动力**,不是约束反力的那些力称为**主动力**. 约束反力通常作用在质点与曲线或曲面的接触点上,在无摩擦的情况下,它沿着曲线或曲面的法向. 令 $\boldsymbol{F}$ 为主动力,$\boldsymbol{R}$ 为约束反力,则质点运动的方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=\boldsymbol{F}+\boldsymbol{R} \tag{1.1.6}$$

既然 $\boldsymbol{R}$ 未知,显然上式的分量方程少于未知数目,所以还要加上约束方程才能求解. 第 5 章我们再讨论具有约束的质点动力学问题.

例 1.1.1 求平面极坐标中的牛顿运动方程.

解: 在平面极坐标中,位置矢量、速度矢量(如图 1.1.1)和加速度矢量的表达式为

$$\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{e}_r;\quad \boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{e}_r+r\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_r}{\mathrm{d}t};\quad \boldsymbol{a}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \tag{1.1.7}$$

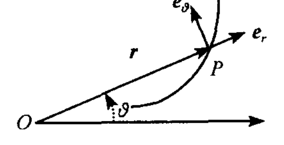


图 1.1.1 平面极坐标

其中 $\boldsymbol{e}_r$ 为径向单位矢量,又由关系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_r}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_r}{\mathrm{d}\vartheta}=\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{e}_\vartheta;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_\vartheta}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_\vartheta}{\mathrm{d}\vartheta}=-\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{e}_r$$

可以得到

$$\boldsymbol{a}=(\ddot{r}-r\dot{\vartheta}^2)\boldsymbol{e}_r+(r\ddot{\vartheta}+2\dot{r}\dot{\vartheta})\boldsymbol{e}_\vartheta \tag{1.1.8}$$

因此在平面极坐标下,牛顿运动方程为

$$m(\ddot{r}-r\dot{\vartheta}^2)=F_r(r,\vartheta;\dot{r},\dot{\vartheta};t)$$
$$m(r\ddot{\vartheta}+2\dot{r}\dot{\vartheta})=F_\vartheta(r,\vartheta;\dot{r},\dot{\vartheta};t) \tag{1.1.9}$$

动量定理：当质点的质量为常数时，牛顿运动方程(1.1.1)可以改写成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{F} \tag{1.1.10}$$

其中矢量 $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$ 称为质点的**动量**(线动量). 因此牛顿第二定律可描述成：**质点动量的时间变化率正比作用在质点上的力**. 上式又称为**动量定理**，积分形式为

$$\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0=m\boldsymbol{v}-m\boldsymbol{v}_0=\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{F}\mathrm{d}t\equiv\boldsymbol{I} \tag{1.1.11}$$

其中矢量 $\boldsymbol{I}$ 称为质点的冲量，通常称为**冲量定理**. 当 $\boldsymbol{F}=0$，$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0$，即**动量守恒**.

角动量定理：当质点作曲线运动时，可以定义力矢量和动量矢量对空间某点或某轴线的矩，对问题的简化是有意义的. 力矢量 $\boldsymbol{F}$ 对空间某点 $\boldsymbol{r}$ 的**力矩**定义为

$$\boldsymbol{M}\equiv\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F} \tag{1.1.12}$$

其分量形式为

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}=\begin{vmatrix}\boldsymbol{e}_x & \boldsymbol{e}_y & \boldsymbol{e}_z\\ x & y & z\\ F_x & F_y & F_z\end{vmatrix}$$
$$=(yF_z-zF_y)\boldsymbol{e}_x+(zF_x-xF_z)\boldsymbol{e}_y+(xF_y-yF_x)\boldsymbol{e}_z \tag{1.1.13}$$

其中 $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ 为直角坐标系的单位矢量. 同样，动量矢量 $\boldsymbol{p}$ 对空间某点 $\boldsymbol{r}$ 的矩定义为

$$\boldsymbol{J}\equiv\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} \tag{1.1.14}$$

称为**动量矩**，或**角动量**. 由式(1.1.10)两边叉乘 $\boldsymbol{r}$ 得到

$$\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F} \tag{1.1.15}$$

注意到

$$\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{p}$$
$$=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})-m\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t} \tag{1.1.16}$$

因此我们得到**动量矩定理**，或**角动量定理**

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{M} \tag{1.1.17}$$

对上式积分，可以得到**冲量矩定理**

$$\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}_0=\int_{t_0}^{t}\boldsymbol{M}\mathrm{d}t \tag{1.1.18}$$

当 $\boldsymbol{M}=0$ 时，$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_0$，即**动量矩守恒**，或**角动量守恒**. 注意：动量矢量或角动量矢量有

可能不守恒，但某个分量完全可能守恒.

例 1.1.2 质点所受的力恒通过某一个定点，证明质点在一个平面上运动.

解： 这样的力称为**有心力**. 取这个定点为坐标系的原点，则力 $\boldsymbol{F}$ 与位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 共线，$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}=0$，因此角动量守恒：$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{C}$（$\boldsymbol{C}$ 为常矢量），即

$$\begin{aligned} m(y\dot{z}-z\dot{y}) &= C_1 \\ m(z\dot{x}-x\dot{z}) &= C_2 \\ m(x\dot{y}-y\dot{x}) &= C_3 \end{aligned} \tag{1.1.19}$$

用 x，y 和 z 分别乘第一个、第二个和第三个方程并相加得

$$C_1x+C_2y+C_3z=0 \tag{1.1.20}$$

由解析几何知，这是一个通过原点的平面，质点只能在这个平面上运动.

动能定理：根据牛顿第二定律可以导出动能定理. 由方程(1.1.2)，两边点乘速度矢量得到

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}\cdot\boldsymbol{v}=\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v} \tag{1.1.21}$$

即

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{v}=\boldsymbol{F}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \tag{1.1.22}$$

上式两边乘 $\mathrm{d}t$ 并利用 $\boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\mathrm{d}(v^2/2)$，得到

$$\mathrm{d}\left(\frac{1}{2}mv^2\right)=\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{1.1.23}$$

标量 $T\equiv mv^2/2$ 称为质点的**动能**. 因此质点动能的微分等于外力 $\boldsymbol{F}$ 做的元功 $\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$，这一结论称为质点的**动能定理**. 对(1.1.23)积分

$$\frac{1}{2}mv^2-\frac{1}{2}mv_0^2=\int_{r_0}^{r}\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int_{(x_0,y_0,z_0)}^{(x,y,z)}F_x\mathrm{d}x+F_y\mathrm{d}y+F_z\mathrm{d}z \tag{1.1.24}$$

上式表明：质点在力 $\boldsymbol{F}$ 的作用下从 $\boldsymbol{r}_0$ 运动到 $\boldsymbol{r}$，如果 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{F}$ 的夹角 $\vartheta<90°$，则力做正功，$v^2>v_0^2$，质点的动能增加；反之，如果 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{F}$ 的夹角 $\vartheta>90°$，则力做负功，$v^2<v_0^2$，质点的动能减少.

例 1.1.3 一质点在力 $\boldsymbol{F}=4y\boldsymbol{e}_x+2x\boldsymbol{e}_y+\boldsymbol{e}_z$ 作用下沿一螺旋线

$$x=4\cos\vartheta,\quad y=4\sin\vartheta,\quad z=2\vartheta \tag{1.1.25}$$

从 $\vartheta=0$ 运动到 $\vartheta=2\pi$，求此力做的功.

解： 该力做功为

$$\begin{aligned} W &= \int\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int 4y\mathrm{d}x+2x\mathrm{d}y+\mathrm{d}z \\ &= \int_0^{2\pi}[16\sin\vartheta\cdot(-4\sin\vartheta)+8\cos\vartheta\cdot4\cos\vartheta+2]\mathrm{d}\vartheta \\ &= -28\pi \end{aligned} \tag{1.1.26}$$

显然该力做负功.

1.2 保守力场、有心力和运动的稳定性

保守力场:力函数一般与空间、时间和质点的速度有关.当力只与空间有关,即$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}(x,y,z)$时,称为**稳定力场**.力场对质点做的功为线积分

$$W=\int_{r_0}^{r}\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int_{(x_0,y_0,z_0)}^{(x,y,z)}F_x\mathrm{d}x+F_y\mathrm{d}y+F_z\mathrm{d}z \tag{1.2.1}$$

一般W与积分路线有关,当W只与初始和终点位置有关时,这样的力场称为**保守力场**.例如:引力场、电荷周围的场、弹性力场等都是保守力场,但电流周围的磁场是非保守力场.由数学分析,保守力场可以用标量函数$U(x,y,z)$来表示,即存在$U(x,y,z)$,使

$$\boldsymbol{F}=-\nabla U(x,y,z) \tag{1.2.2}$$

函数$U(x,y,z)$称为**势函数**.显然保守力场的旋度为零,即$\nabla\times\boldsymbol{F}=0$,故保守力场是无旋的.对保守力场,方程(1.1.24)变成

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}mv^2-\frac{1}{2}mv_0^2&=-\int_{(x_0,y_0,z_0)}^{(x,y,z)}\frac{\partial U}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial U}{\partial y}\mathrm{d}y+\frac{\partial U}{\partial z}\mathrm{d}z\\&=-[U(x,y,z)-U(x_0,y_0,z_0)]\\&=-(U-U_0)\end{aligned} \tag{1.2.3}$$

即质点的**机械能守恒**

$$\frac{1}{2}mv^2+U=\frac{1}{2}mv_0^2+U_0\equiv E \tag{1.2.4}$$

这就是**机械能守恒定律**.E称为**总机械能**,它是动能T和势能U之和.

对一维的保守力,机械能守恒定律为

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2+U(x)=E \tag{1.2.5}$$

即

$$\dot{x}=\pm\sqrt{\frac{2}{m}[E-U(x)]} \tag{1.2.6}$$

因此,质点不可能在$E<U(x)$的区域运动,如图1.2.1,当质点从左边入射,运动到x_1点时,质点被反射回去,不可能穿过势垒.这是经典力学的结论,但在量子力学中,质点可以穿过势垒,这一现象称为**隧道效应**,我们将在第13章讨论.

图1.2.1 总能量和势能曲线

显然,当质点处于平衡状态时

$$\frac{\partial U}{\partial x}=0;\quad\frac{\partial U}{\partial y}=0;\quad\frac{\partial U}{\partial z}=0 \tag{1.2.7}$$

故平衡点是势函数的极值点. 当极值点是极小时,平衡是稳定的(如图 1.2.1 的 x_0 点);而当极值点是极大时,平衡不稳定(如图 1.2.1 的 x_2 点). 故稳定平衡的条件可以写为 $\Delta U>0$,即

$$\delta U = 0; \quad \delta^2 U > 0 \tag{1.2.8}$$

例 1.2.1 质量为 m 的粒子在势函数为

$$U(x) = \frac{cx}{x^2 + a^2} \tag{1.2.9a}$$

的保守力场中运动,其中 $c>0, a>0$ 为常数. 求稳定平衡点的位置及在稳定平衡点附近作小振动的角频率.

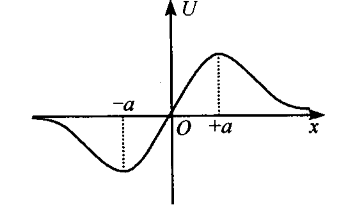


图 1.2.2 势函数曲线

解: 势函数形状如图 1.2.2,平衡点位置满足

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x} = \frac{c(a^2 - x^2)}{(x^2 + a^2)^2} = 0 \tag{1.2.9b}$$

故存在两个平衡点

$$x_1 = a; \quad x_2 = -a \tag{1.2.9c}$$

由稳定条件

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x_1=a} = -\frac{c}{2a^3} < 0; \quad \left.\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x_2=-a} = \frac{c}{2a^3} > 0 \tag{1.2.9d}$$

故 $x_1=a$ 是不稳定平衡点,而 $x_2=-a$ 是稳定平衡点. 如图 1.2.2 也可见,右边是极大点,左边是极小点. 在平衡点附近,令 $x=-a+x'$,作用力

$$f(x') = -\left.\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a+x'} = -\frac{c(2ax' - x'^2)}{(x'^2 - 2ax' + 2a^2)^2} \approx -\frac{cx'}{2a^3}$$

故振动角频率为

$$\omega = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{c}{2ma}} \tag{1.2.10}$$

有心力场:下面讨论质点在有心力场中的运动. 由例 1.1.2,质点在平面内运动,故用平面极坐标. 设有心力为

$$\boldsymbol{F} = F(r)\boldsymbol{e}_r \tag{1.2.11}$$

其中吸引力 $F(r)<0$,排斥力 $F(r)>0$. 运动方程为

$$\begin{aligned} m(\ddot{r} - r\dot{\vartheta}^2) &= F(r) \\ m(r\ddot{\vartheta} + 2\dot{r}\dot{\vartheta}) &= 0 \end{aligned} \tag{1.2.12}$$

第二式可以改写成

$$m\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r^2\dot{\vartheta}) = 0 \tag{1.2.13}$$

即 $mr^2\dot{\vartheta}=h'$(h' 为常量),显然这表示角动量守恒,与例 1.1.2 的结论是一致的. 可以证明 $\boldsymbol{F}=F(r)\boldsymbol{e}_r$ 是保守力. 事实上,因为

$$W = \int_{r_0}^{r} \boldsymbol{F} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \int_{r_0}^{r} F(r)\mathrm{d}r \tag{1.2.14}$$

积分只与初始和终点位置的矢径 $\boldsymbol{r}$ 有关，而与具体的路径无关，所以 $\boldsymbol{F}=F(r)\boldsymbol{e}_r$ 是保守力. 利用角动量守恒性质 $r^2\dot{\vartheta}=h$(h 为常量)，令 $u=1/r$，那么

$$\dot{\vartheta} = hu^2 \tag{1.2.15}$$

又

$$\dot{r}= \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\vartheta}\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\frac{1}{u}\right)\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} =-\frac{1}{u^2}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\vartheta}hu^2 =-h\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\vartheta}$$

$$\ddot{r}=-h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\vartheta}\right)=-h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\vartheta}\right)\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} =-h^2u^2\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\vartheta^2}$$

代入方程(1.2.12)第一式

$$-mh^2u^2\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\vartheta^2}+u\right)= F\left(\frac{1}{u}\right) \tag{1.2.16}$$

故上式给出了 $r=r(\vartheta)$ 满足的微分方程，从而可求得质点的运动轨道. 考虑氢原子核外电子绕核的运动，电子受核的吸引力为 $\boldsymbol{F}=F(r)\boldsymbol{e}_r$，其中

$$F(r) =-\frac{km}{r^2} \tag{1.2.17}$$

式中 $k=q^2/(4\pi\varepsilon_0 m)$. 利用机械能守恒公式(1.2.4)更方便. 因 $\boldsymbol{F}=-\boldsymbol{\nabla} U$，所以

$$U(r) =-\int F(r)\mathrm{d}r = \int \frac{km}{r^2}\mathrm{d}r \tag{1.2.18}$$

取无限远点为势函数的零点，那么

$$U(r) = \int_{\infty}^{r} \frac{km}{r^2}\mathrm{d}r =-\frac{km}{r} =-\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{1.2.19}$$

于是式(1.2.4)变成

$$\frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2) - \frac{km}{r} = E \tag{1.2.20}$$

因为

$$\dot{r} = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\vartheta}\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t} = \frac{h}{r^2}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\vartheta} \tag{1.2.21}$$

上式已利用了角动量守恒：$r^2\dot{\vartheta}=h$(h 为常量)，于是

$$\frac{1}{2}m\left[\frac{h^2}{r^4}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\vartheta}\right)^2 + \frac{h^2}{r^2} - \frac{2k}{r}\right]= E \tag{1.2.22}$$

即

$$\frac{h\mathrm{d}r}{r\sqrt{\frac{2E}{m}r^2 + 2kr - h^2}} = \mathrm{d}\vartheta \tag{1.2.23}$$

两边积分，最后得到

$$r = \frac{h^2/k}{1 + e\cos(\vartheta - \vartheta_0)} \tag{1.2.24}$$

其中 e 定义为

$$e = \sqrt{1 + \frac{2E}{m}\left(\frac{h}{k}\right)^2} \tag{1.2.25}$$

所以，当 $E<0$ 时，$e<1$，轨道为椭圆；当 $E=0$ 时，$e=1$，轨道为抛物线；当 $E>0$ 时，$e>1$，轨道为双曲线.

例 1.2.2 一粒子在有心力作用下做半径为 R 的圆周运动，证明当

$$F(R) < -\frac{R}{3}\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r}\right)\bigg|_{r=R} \tag{1.2.26}$$

时轨道是稳定的，其中 $F(r)$ 是作用力的大小. 当 $F(r)=-k/r^n$，证明稳定性条件 $n<3$.

解： 由方程(1.2.12)

$$m(\ddot{r} - r\dot{\vartheta}^2) = F(r); \quad r^2\dot{\vartheta} = h \tag{1.2.27}$$

当质点做半径为 $r=R$ 的圆周运动时，$\dot{r}=0$，上式变成

$$mR\omega^2 = -F(R); \quad R^2\omega = h \tag{1.2.28}$$

假定存在一个微扰

$$r(t) = R + \delta r(t); \quad \dot{\vartheta} = \omega + \delta\dot{\vartheta}(t) \tag{1.2.29}$$

代入方程(1.2.28)的第二式，得到

$$[R + \delta r(t)]^2[\omega + \delta\dot{\vartheta}(t)] = h + \delta h \tag{1.2.30}$$

忽略二阶项及二阶以上项，且再利用方程(1.2.28)中第二式得到

$$\delta\dot{\vartheta} = \frac{1}{R^2}(\delta h - 2R\omega\delta r) \tag{1.2.31}$$

把式(1.2.29)代入方程(1.2.28)中第一式

$$m[\delta\ddot{r} - (R + \delta r)(\omega + \delta\dot{\vartheta})^2] = F(R) + \left[\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r}\right]\bigg|_{r=R}\delta r \tag{1.2.32}$$

忽略二阶项和二阶以上项，得到

$$m\delta\ddot{r} - 2mR\omega\delta\dot{\vartheta} - m\omega^2\delta r = \left[\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r}\right]\bigg|_{r=R}\delta r \tag{1.2.33}$$

把式(1.2.31)代入上式且利用式(1.2.28)

$$m\delta\ddot{r} - \left\{\frac{3F(R)}{R} + \left[\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r}\right]\bigg|_{r=R}\right\}\delta r = 2m\omega\frac{\delta h}{R} \tag{1.2.34}$$

当

$$\frac{3F(R)}{R} + \left[\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r}\right]\bigg|_{r=R} < 0 \tag{1.2.35}$$

时，方程(1.2.34)为周期振动方程，于是稳定条件为

$$F(R) < -\frac{R}{3}\left[\frac{\mathrm{d}F(r)}{\mathrm{d}r}\right]\bigg|_{r=R} \tag{1.2.36}$$

当 $F(r)=-k/r^n$ 时，上式为

$$\frac{k}{R^n} > \frac{n}{3}\frac{k}{R^n} \tag{1.2.37}$$

故 $n<3$.

1.3 质点组动力学：动量、角动量和位力定理

首先介绍**内力和外力**的概念：质点组中质点之间的相互作用力称为**内力**，用上标(i)表示；质点组以外的物体对质点组中任何一个质点的作用力称为**外力**，用上标(e)表示. 对质点组中的任何一组质点(i,k)，设第 i 个质点对第 k 个质点的作用力为 $\boldsymbol{F}_{ik}^{(\mathrm{i})}$，第 k 个质点对第 i 个质点的作用力为 $\boldsymbol{F}_{ki}^{(\mathrm{i})}$，内力(一般是机械力)满足牛顿第三定律：$\boldsymbol{F}_{ik}^{(\mathrm{i})}=-\boldsymbol{F}_{ki}^{(\mathrm{i})}$. 因此，质点组的合内力为零

$$\boldsymbol{F}^{(\mathrm{i})}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{k\neq i}^{n}\boldsymbol{F}_{ik}^{(\mathrm{i})}=0 \tag{1.3.1}$$

假定系统由 n 个离散的质点组成：$m_1,m_2,\cdots,m_n$，分别位于 $P_1,P_2,\cdots,P_n$ 点，它们的位置矢量为 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n$，并假定外力 $\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}$ 作用在其中第 i 个质点 A 上，如果质点 A 与其他质点 B,C,D,…等无任何相互作用，那么 A 的运动由牛顿运动定律决定. 如果质点之间存在相互作用，那么 A 的运动必改变 A 与其他质点的相互作用力，从而使其他质点的运动状态也随之变化. 就质点 A 而言，我们可以单独写出它的运动方程

$$m_i\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2}=\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}+\sum_{k\neq i}^{n}\boldsymbol{F}_{ki}^{(\mathrm{i})} \tag{1.3.2}$$

因为 $\boldsymbol{F}_{ki}^{(\mathrm{i})}$ 与其他质点的运动量(位置矢量和速度矢量)有关，必须写出每个质点的运动方程，当质点数目较大时，根本无法求解. 但如果利用动力学基本原理，就可以得到整个质点组在外力作用下运动的某些特征.

质点组动量定理：方程(1.3.2)两边求和得到

$$\sum_{i=1}^{n}m_i\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}+\sum_{i=1}^{n}\sum_{k\neq i}^{n}\boldsymbol{F}_{ki}^{(\mathrm{i})}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}\equiv\boldsymbol{F}^{(\mathrm{e})} \tag{1.3.3}$$

得到上式，已经利用了式(1.3.1)，$\boldsymbol{F}^{(\mathrm{e})}$ 为整个质点组受到的合外力. 因为

$$\sum_{i=1}^{n}m_i\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{i=1}^{n}\left(m_i\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{i=1}^{n}m_i\boldsymbol{v}_i\equiv\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}}{\mathrm{d}t}$$

式中 $\boldsymbol{P}$ 为质点组的总动量，于是方程(1.3.3)可写成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}}{\mathrm{d}t}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})} \tag{1.3.4}$$

上式称为**质点组动量定理**. 注意:方程右边是合外力,因此整个质点组的动量变化只与外力有关,而与内力无关.

质心运动定理:质点组中的一个特殊点 $\boldsymbol{r}_c$,由下式决定

$$\boldsymbol{r}_c = \sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i \Big/ \sum_{i=1}^{n} m_i \tag{1.3.5}$$

上式改写成

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_c \sum_{i=1}^{n} m_i \tag{1.3.6}$$

两边对时间求导得到

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{v}_i = \sum_{i=1}^{n} m_i \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_c}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{P} \tag{1.3.7}$$

代入方程(1.3.4)

$$m \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_c}{\mathrm{d}t^2} = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{F}_i^{(e)} \tag{1.3.8}$$

其中 m 是质点组的总质量. 上式即为**质心运动定理**:质点组质心的运动就好象一个质点的运动一样,此质点的质量等于整个质点组的总质量,作用在此质点上的力等于作用在质点组上所有外力的矢量和.

质点组动量守恒定律:若质点组不受外力,或者合外力为零,由方程(1.3.4)

$$\boldsymbol{P} = \text{恒矢量} \tag{1.3.9}$$

或者由方程(1.3.8)

$$\boldsymbol{v}_c = \text{恒矢量} \tag{1.3.10}$$

在此情况下,质点组的总动量守恒且质心作惯性运动. 这个关系称为**质点组动量守恒定律**. 可见内力虽然可使质点组中个别质点改变动量,但却不能改变整个质点组的总动量,也不能改变质点组质心的运动速度.

对质点组,同样存在角动量定理. 根据方程(1.3.2)

$$m_i \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \boldsymbol{F}_i^{(e)} + \boldsymbol{F}_i^{(i)}; \quad \boldsymbol{F}_i^{(i)} = \sum_{k \neq i}^{n} \boldsymbol{F}_{ki}^{(i)} \tag{1.3.11}$$

其中 $\boldsymbol{F}_i^{(i)}$ 为其他所有质点对第 i 个质点的合内力. 上式两边矢乘位置矢量并对 i 求和

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i \times \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i^{(e)} + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i^{(i)} \tag{1.3.12}$$

由于内力成对出现,$\boldsymbol{F}_{ik}^{(i)} = -\boldsymbol{F}_{ki}^{(i)}$,对原点 O 的力矩之和为零,即

$$\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i^{(i)} = 0 \tag{1.3.13}$$

又

$$\boldsymbol{r}_i \times \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\boldsymbol{r}_i \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right) \tag{1.3.14}$$

故式(1.3.12)可写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{r}_i\times m_i\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right)=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}\tag{1.3.15}$$

定义质点组对原点 O 的动量矩和力矩分别为

$$\boldsymbol{J}=\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{r}_i\times m_i\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right);\quad \boldsymbol{M}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}\tag{1.3.16}$$

由(1.3.15),我们得到**质点组角动量定理**

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{M}\tag{1.3.17}$$

当 $\boldsymbol{M}=0$ 时,$\boldsymbol{J}=$常矢量.此为**质点组角动量守恒定律**.

由方程(1.3.11),仿照方程(1.1.23),我们可以得到**质点组动能定理**

$$\mathrm{d}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{2}m_i\dot{r}_i^2\right)=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i+\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{i})}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i\tag{1.3.18}$$

注意:由于内力对动量和角动量的贡献相互抵消,质点组动量定理和质点组角动量定理中不出现内力,但在质点组动能定理中,内力的贡献通常并不能互相抵消,故质点组即使不受外力,或虽受外力作用而互相平衡时,质点组的动能并不守恒.可用两个质点的情况说明.设质点 1 和质点 2 所受的内力分别为 $\boldsymbol{f}_{21}^{(\mathrm{i})}$ 和 $\boldsymbol{f}_{12}^{(\mathrm{i})}$,且 $\boldsymbol{f}_{12}^{(\mathrm{i})}=-\boldsymbol{f}_{21}^{(\mathrm{i})}$,那么两个内力做的元功为

$$\mathrm{d}W=\boldsymbol{f}_{21}^{(\mathrm{i})}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{f}_{12}^{(\mathrm{i})}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{f}_{21}^{(\mathrm{i})}\cdot(\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1-\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2)=\boldsymbol{f}_{21}^{(\mathrm{i})}\cdot\mathrm{d}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$$

而 $\mathrm{d}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 是两个质点的相对位置变化,除非是刚体,一般 $\mathrm{d}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 不可能为零.

例 1.3.1　两体问题:分析质点 m 在质点 M 的引力作用下的运动情况.

解:　在同一惯性坐标系内,设质点 m 和 M 的位置矢量分别为 $\boldsymbol{r}_m$ 和 $\boldsymbol{r}_M$,那么质点 m 和 M 的运动方程为

$$\begin{aligned}M\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_M}{\mathrm{d}t^2}&=-\frac{GMm(\boldsymbol{r}_M-\boldsymbol{r}_m)}{|\boldsymbol{r}_M-\boldsymbol{r}_m|^3}\\ m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_m}{\mathrm{d}t^2}&=\frac{GMm(\boldsymbol{r}_M-\boldsymbol{r}_m)}{|\boldsymbol{r}_M-\boldsymbol{r}_m|^3}\end{aligned}\tag{1.3.19}$$

其中 G 是万有引力常量,第一式与第二式相加得到

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}(M\boldsymbol{r}_M+m\boldsymbol{r}_m)=0\tag{1.3.20}$$

而根据方程(1.3.5),质点 m 和 M 的质心坐标为

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{c}}=\frac{M\boldsymbol{r}_M+m\boldsymbol{r}_m}{M+m}\tag{1.3.21}$$

因此质心作惯性运动.方程(1.3.19)第一、二式分别乘 m、M 并相减得

$$Mm\frac{\mathrm{d}^2(\boldsymbol{r}_m-\boldsymbol{r}_M)}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{GMm(\boldsymbol{r}_m-\boldsymbol{r}_M)}{|\boldsymbol{r}_m-\boldsymbol{r}_M|^3}(M+m)\tag{1.3.22}$$

而 $\boldsymbol{r}\equiv\boldsymbol{r}_m-\boldsymbol{r}_M$ 是 m 相对于 M 的坐标，因此我们得到 m 相对于 M 的运动方程

$$\frac{m}{(1+m/M)}\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{GMm\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3} \tag{1.3.23}$$

如果质点 M 远大于质点 m，即 $m/M\approx0$，那么上式相当于质点 M 固定不动，而质点 m 围绕着质点 M 作运动，如果 m/M 有限大，相当于对质点 m 的质量作一修正，μ 称为**折合质量**

$$\mu\equiv\frac{m}{(1+m/M)} \tag{1.3.24}$$

把 GMm 换成 $q^2/(4\pi\varepsilon_0)$，方程(1.3.23)就变成氢原子核与核外电子的相对运动方程. 值得指出的是：式(1.3.19)中的质量 m(或者 M)称为**引力质量**，原则上区别于式(1.1.1)中的惯性质量. 但实践证明二者是相同的.

位力定理：下面来考察标量 G 的性质(注意：不是万有引力常量)，G 定义为

$$G=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}_i \tag{1.3.25}$$

求 G 对时间的导数

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}=\sum_{i=1}^{n}\dot{\boldsymbol{p}}_i\cdot\boldsymbol{r}_i+\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{p}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i \tag{1.3.26}$$

上式右边的第二项可写成

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{p}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i=\sum_{i=1}^{n}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i=\sum_{i=1}^{n}m_i\boldsymbol{v}_i^2=2T \tag{1.3.27}$$

而第一项为

$$\sum_{i=1}^{n}\dot{\boldsymbol{p}}_i\cdot\boldsymbol{r}_i=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\boldsymbol{r}_i \tag{1.3.28}$$

注意：上式中的力 $\boldsymbol{F}_i$ 包括质点受到的外力和内力. 于是

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}=2T+\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\boldsymbol{r}_i \tag{1.3.29}$$

在时间$(0,\tau)$内求平均

$$\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau}\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t=2\overline{T}+\overline{\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\boldsymbol{r}_i}=\frac{1}{\tau}[G(\tau)-G(0)] \tag{1.3.30}$$

因为 G 是 $\boldsymbol{p}_i$ 和 $\boldsymbol{r}_i$ 的函数，只要每个质点的动量和坐标是有限值，那么 G 也有限，因此足够长时间后，上式右边为零. 于是

$$\overline{T}=-\frac{1}{2}\overline{\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\boldsymbol{r}_i} \tag{1.3.31}$$

称为**位力定理**. 它表明：在足够长时间内，质点组的动能平均与“均功”存在着一个简单的关系. 如果为保守力，则

$$\overline{T} = \frac{1}{2}\overline{\sum_{i=1}^{n}(\nabla_i U)\cdot \boldsymbol{r}_i} \tag{1.3.32}$$

其中∇算子的下标表示对第 i 个粒子求梯度. 如果只有一个质点且受有心力的作用,位力定理简化为

$$\overline{T} = \frac{1}{2}\overline{\frac{\partial U}{\partial r}\cdot r} \tag{1.3.33}$$

当$U(r)$是 r 的幂次函数,即$U(r)=ar^{n+1}$时,上式简化为

$$\overline{T} = \frac{1}{2}(n+1)\overline{U} \tag{1.3.34}$$

对平方反比的力,$n=-2$,故 $\overline{T}=-\overline{U}/2$. 注意:位力定理要求坐标是有限值. 质点受平方反比的吸引力作用时,轨迹可能是椭圆、抛物线或者双曲线. 在后两种情况下,坐标不是有限值. 故只有当轨迹是椭圆的情况,位力定理才成立.

1.4 非惯性参考系:惯性离心力和科里奥利力

由伽利略相对性原理,相对于惯性参考系作匀速直线运动的一切参考系都是惯性参考系,牛顿运动定律只有在惯性参考系中才成立. 问题是:如果有一个参考系(用 S 表示)相对于某个惯性参考系(用 S'表示)作加速运动时,牛顿第二运动定律又如何表达呢?

平动参考系:假设在惯性参考系 S'和非惯性参考系 S 中,物体的位置矢量分别为 $\boldsymbol{r}'$和 $\boldsymbol{r}$,S 的原点 O 在 S'中的坐标为 $\boldsymbol{R}$,显然有关系:$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}$,因此在惯性参考系 S'中,物体运动的速度为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} \tag{1.4.1}$$

而加速度为

$$\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t^2} = \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} + \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2} \tag{1.4.2}$$

对惯性参考系 S',牛顿第二运动定律成立

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t^2} = \boldsymbol{F} = m\left(\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} + \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2}\right) \tag{1.4.3}$$

即

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = \boldsymbol{F} + \left(-m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2}\right) \equiv \boldsymbol{F}' \tag{1.4.4}$$

因此在非惯性参考系 S 中,形式上,牛顿第二运动定律仍然成立,但力的项需作修正:附加的力($-m\ddot{\boldsymbol{R}}$)称为**惯性力**. 当参考系 S 相对惯性参考系 S'作匀速直线运动时:$\ddot{\boldsymbol{R}}=0$. 牛顿第二运动定律回到原来的形式,参考系 S 变为惯性参考系.

例 1.4.1 质点组对质心的角动量.

解： 设质点组的质心为 $\boldsymbol{r}_c$，S 为固定在质心上的坐标系且原点为质心，一般质心作变速运动(平动)，故质心坐标系为非惯性参考系，质点组中任一质点的运动方程为

$$m_i \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \boldsymbol{F}_i^{(e)} + \boldsymbol{F}_i^{(i)} + \left(-m_i \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_c}{\mathrm{d}t^2}\right) \tag{1.4.5}$$

式中右边最后一项为惯性力，$\boldsymbol{r}_i$ 是质点在质心坐标系中的位置矢量. 将上式左叉乘 $\boldsymbol{r}_i$ 并求和，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right] = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i^{(e)} + \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_c}{\mathrm{d}t^2} \times \sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i \tag{1.4.6}$$

这里，我们已利用了内力成对出现，合内力矩为零的条件. 因在质心坐标系中，质心即为原点坐标，所以

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i = 0 \tag{1.4.7}$$

故(1.4.6)式简化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum_{i=1}^{n} m_i \boldsymbol{r}_i \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right] = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i^{(e)} \tag{1.4.8}$$

上式左边括号内为质点组对质心的角动量之和(用 $\boldsymbol{J}_c$ 表示)，而右边则为所有的外力对质心的力矩之和(用 $\boldsymbol{M}_c$ 表示)，因此对质心的角动量定理为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}_c}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{M}_c \tag{1.4.9}$$

(1.4.9)式与方程(1.3.17)(即质点组相对于惯性参考系的角动量定理)有相同的形式，但角动量 $\boldsymbol{J}_c$ 和力矩 $\boldsymbol{M}_c$ 是在质心坐标系中相对于质心定义的.

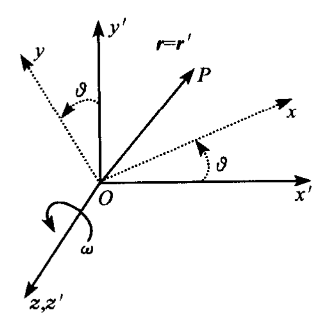


图 1.4.1 平面转动参考系

平面转动参考系： 下面讨论较复杂的情况，即非惯性参考系 S 相对于惯性参考系 S' 有转动的情况. 首先考虑平面转动参考系. 如图 1.4.1，非惯性参考系 S 以角速度 ω 绕 z 轴(或 z' 轴，因为 z 与 z' 轴重合)旋转. 质点位置矢量在非惯性参考系 S 和惯性参考系 S' 中分别为 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$，而 S 与 S' 的原点重合，故 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}'$. 在平面转动参考系 S 中，它的分量形式为 $\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y$. 因此，质点对惯性参考系 S' 的速度为

$$\boldsymbol{v}' = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \dot{x}\boldsymbol{e}_x + \dot{y}\boldsymbol{e}_y + x\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_x}{\mathrm{d}t} + y\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_y}{\mathrm{d}t} \tag{1.4.10}$$

注意：如果是求质点相对于非惯性参考系 S 的速度，那么 $\dot{\boldsymbol{e}}_x=\dot{\boldsymbol{e}}_y=0$，因在 S 中，它们是常矢量. 在 S 以角速度 ω 绕 z 轴旋转的情况下

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_x}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_x}{\mathrm{d}\vartheta}\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t}=\omega\boldsymbol{e}_y;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_y}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_y}{\mathrm{d}\vartheta}\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\mathrm{d}t}=-\omega\boldsymbol{e}_x \tag{1.4.11}$$

于是

$$\boldsymbol{v}'=(\dot{x}-\omega y)\boldsymbol{e}_x+(\dot{y}+\omega x)\boldsymbol{e}_y \tag{1.4.12}$$

把 ω 写成矢量形式：$\boldsymbol{\omega}=\omega\boldsymbol{e}_z$（关于角速度的矢量特性将在 2.1 节中讨论），于是

$$\boldsymbol{v}'=(\dot{x}\boldsymbol{e}_x+\dot{y}\boldsymbol{e}_y)+(-\omega y\boldsymbol{e}_x+\omega x\boldsymbol{e}_y)=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r} \tag{1.4.13}$$

质点对惯性参考系 S' 的加速度为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}'=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}'}{\mathrm{d}t}&=(\ddot{x}-2\omega\dot{y}-\omega^2x)\boldsymbol{e}_x+(\ddot{y}+2\omega\dot{x}-\omega^2y)\boldsymbol{e}_y\\&\quad-\dot{\omega}y\boldsymbol{e}_x+\dot{\omega}x\boldsymbol{e}_y\\&=(\ddot{x}\boldsymbol{e}_x+\ddot{y}\boldsymbol{e}_y)-\omega^2(x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y)\\&\quad+(-\dot{\omega}y\boldsymbol{e}_x+\dot{\omega}x\boldsymbol{e}_y)+(-2\omega\dot{y}\boldsymbol{e}_x+2\omega\dot{x}\boldsymbol{e}_y)\\&=\ddot{\boldsymbol{r}}-\omega^2\boldsymbol{r}+\dot{\boldsymbol{\omega}}\times\boldsymbol{r}+2\boldsymbol{\omega}\times\dot{\boldsymbol{r}}\end{aligned} \tag{1.4.14}$$

分析上式各项：第一项为质点对非惯性参考系 S 的**相对加速度**；由于非惯性参考系 S 以 $\boldsymbol{\omega}$ 转动，因此第二项为**向心加速度**；第三项是由于非惯性参考系 S 以变角速度转动而引起的**切向加速度**，第二和三项都是由于非惯性参考系 S 相对惯性参考系 S' 转动引起的，所以称为**牵引加速度**；第四项的物理意义是什么呢？显然 $2\boldsymbol{\omega}\times\dot{\boldsymbol{r}}$ 为位于 xOy 平面内的矢量，称为**科里奥利加速度**，它在平动情况下是不存在的，$2\boldsymbol{\omega}\times\dot{\boldsymbol{r}}$ 是由于转动 $\boldsymbol{\omega}$ 与相对运动 $\dot{\boldsymbol{r}}$ 相互作用而产生的.

在惯性参考系 S' 内，牛顿第二定律成立，故 $m\boldsymbol{a}'=\boldsymbol{F}$，即

$$m\ddot{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{F}+m\omega^2\boldsymbol{r}-2m\boldsymbol{\omega}\times\dot{\boldsymbol{r}}-m\dot{\boldsymbol{\omega}}\times\boldsymbol{r} \tag{1.4.15}$$

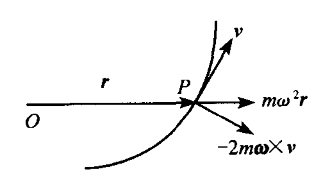


图 1.4.2 惯性离心力和科里奥利力

因此在平面转动的非惯性参考系 S 内，惯性力有三种：惯性离心力 $m\omega^2\boldsymbol{r}$，科里奥利力 $-2m\boldsymbol{\omega}\times\dot{\boldsymbol{r}}$，以及由于变角速度运动引起的惯性力 $-m\dot{\boldsymbol{\omega}}\times\boldsymbol{r}$. 显然惯性离心力的方向在径向，而科里奥利力的方向指向速度的右侧面，如图 1.4.2.

空间转动参考系：考虑一般的空间转动问题. 假定角速度矢量 $\boldsymbol{\omega}$ 任意，并且非惯性参考系 S 与惯性参考系 S' 的原点不重合，即 S 系相对于 S' 系还有平动. 在惯性参考系 S' 内，质点的位置矢量为

$$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R} \tag{1.4.16}$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 为质点在非惯性参考系 S 内的位置矢量，$\boldsymbol{R}$ 为 S 系的原点在 S' 系中的坐标. 上式求导得到惯性参考系 S' 内观察到的质点速度

$$\boldsymbol{v}'=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} \tag{1.4.17}$$

在非惯性参考系 S 内 $\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z$，故

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\dot{x}\boldsymbol{e}_x+\dot{y}\boldsymbol{e}_y+\dot{z}\boldsymbol{e}_z+x\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_x}{\mathrm{d}t}+y\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_y}{\mathrm{d}t}+z\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_z}{\mathrm{d}t} \tag{1.4.18}$$

在 S' 系中观察，$\boldsymbol{e}_x$、$\boldsymbol{e}_y$ 和 $\boldsymbol{e}_z$ 相当于转动的位置矢量，利用 2.1 节中式(2.1.3)

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_x}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{e}_x;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_y}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{e}_y;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{e}_z}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{e}_z \tag{1.4.19}$$

式(1.4.18)成为

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}+\omega\times\boldsymbol{r} \tag{1.4.20}$$

其中

$$\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\dot{x}\boldsymbol{e}_x+\dot{y}\boldsymbol{e}_y+\dot{z}\boldsymbol{e}_z \tag{1.4.21}$$

事实上，可证明对非惯性参考系 S 内的任一矢量 $\boldsymbol{G}=G_x\boldsymbol{e}_x+G_y\boldsymbol{e}_y+G_z\boldsymbol{e}_z$，在惯性参考系 S' 内的变化率为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{G}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{G}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{G};\quad \frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{G}}{\mathrm{d}t}=\dot{G}_x\boldsymbol{e}_x+\dot{G}_y\boldsymbol{e}_y+\dot{G}_z\boldsymbol{e}_z \tag{1.4.22}$$

因此加速度矢量为

$$\boldsymbol{a}'=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}'}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2}=\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{v}+\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2} \tag{1.4.23}$$

式(1.4.20)代入上式

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}'&=\frac{\mathrm{d}^*}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}\right)+\boldsymbol{\omega}\times\left(\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}\right)+\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2}\\&=\frac{\mathrm{d}^{2*}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}+\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})+2\boldsymbol{\omega}\times\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2}\end{aligned} \tag{1.4.24}$$

又利用等式

$$\begin{gathered}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\omega}=\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\\ \boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})=\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r})-\omega^2\boldsymbol{r}\end{gathered} \tag{1.4.25}$$

代入方程(1.4.24)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}'&=\frac{\mathrm{d}^{2*}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}+\left[\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r})-\omega^2\boldsymbol{r}\right]+2\boldsymbol{\omega}\times\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t^2}\\&\equiv\boldsymbol{a}+\boldsymbol{a}_{\mathrm{t}}+\boldsymbol{a}_{\mathrm{c}}+\boldsymbol{a}_{\mathrm{m}}\end{aligned} \tag{1.4.26}$$

其中

$$\boldsymbol{a}=\frac{\mathrm{d}^{2*}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} \tag{1.4.27}$$

代表质点相对于非惯性参考系 S 的加速度，即**相对加速度**；

$$\boldsymbol{a}_{\mathrm{t}}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r})-\omega^2\boldsymbol{r} \tag{1.4.28}$$

为**牵引加速度**；而

$$a_c = 2\boldsymbol{\omega} \times \frac{\mathrm{d}^* \boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \tag{1.4.29}$$

为**科里奥利加速度**；至于最后一项 $\boldsymbol{a}_m$，显然为平动加速度，因为它的存在不增加新的物理内容，故在下面的讨论中忽略 $\boldsymbol{a}_m$.

同样在惯性参考系 S' 内，牛顿第二定律成立：$m\boldsymbol{a}'=\boldsymbol{F}$，即

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F} - m\boldsymbol{a}_t - m\boldsymbol{a}_c \tag{1.4.30}$$

或者

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F} - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \times \boldsymbol{r} - m[\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{r}) - \omega^2 \boldsymbol{r}] - 2m\boldsymbol{\omega} \times \dot{\boldsymbol{r}} \tag{1.4.31}$$

因此，在一般空间转动的非惯性参考系 S 内，惯性力同样有三种：惯性离心力 $m[\omega^2\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r})]$，科里奥利力 $-2m\boldsymbol{\omega}\times\dot{\boldsymbol{r}}$，以及由于变角速度运动引起的惯性力 $-m\dot{\boldsymbol{\omega}}\times\boldsymbol{r}$.

当质点在非惯性参考系 S 内固定不动时，即 $\dot{\boldsymbol{r}}=0$

$$\boldsymbol{F} - m\dot{\boldsymbol{\omega}} \times \boldsymbol{r} - m[\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{r}) - \omega^2 \boldsymbol{r}] = 0 \tag{1.4.32}$$

即当质点在非惯性参考系 S 中处于平衡时，作用力（包括主动力和约束反作用力）$\boldsymbol{F}$ 与牵引运动产生的惯性力的矢量和为零. 这种平衡称为**相对平衡**.

例 1.4.2　地球的自转.

解： 我们知道地球不是严格意义上的惯性参考系. 地球有公转和自转，公转的角速度很小，自转的角速度为 7.3×10^{-5} rad/s，虽然也较小，但可对地球上物体的运动产生影响. 如果质点相对地球的运动速度为零，则仅需要考虑惯性离心力的影响. 由于惯性离心力的作用，使重力小于引力，引力的作用线通过地球的球心，而重力的作用线一般并不通过地球的球心.

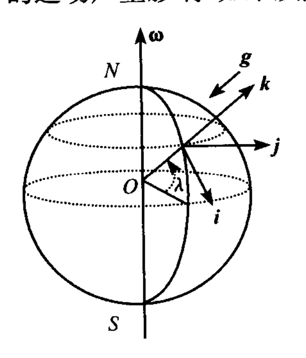


图 1.4.3　地球自转的影响

当质点相对地球运动时，必须同时考虑惯性离心力和科里奥利力，但质点离地轴的距离变化一般不是很大，可把惯性离心力包含到重力里去，而只考虑科里奥利力的效应. 如图 1.4.3，质点 P 的纬度为 λ，单位矢量 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 固定在地球上，且 $\boldsymbol{i}$ 的水平向南，$\boldsymbol{j}$ 水平向东，$\boldsymbol{k}$ 竖直向上，仅考虑科里奥利力的运动方程为

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{F} - mg\boldsymbol{k} - 2m\boldsymbol{\omega} \times \dot{\boldsymbol{r}} \tag{1.4.33}$$

其中 $\boldsymbol{F}$ 为重力以外的其他作用力. 因为

$$\boldsymbol{\omega} \times \dot{\boldsymbol{r}} = \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ -\omega\cos\lambda & 0 & \omega\sin\lambda \\ \dot{x} & \dot{y} & \dot{z} \end{vmatrix}$$

$$= -\omega\dot{y}\sin\lambda\boldsymbol{i} + (\omega\dot{z}\cos\lambda + \omega\dot{x}\sin\lambda)\boldsymbol{j} - \omega\dot{y}\cos\lambda\boldsymbol{k} \tag{1.4.34}$$

分量方程为

$$
\begin{aligned}
m\ddot{x} &= F_x + 2m\omega\dot{y}\sin\lambda \\
m\ddot{y} &= F_y - 2m\omega(\dot{z}\cos\lambda + \dot{x}\sin\lambda) \\
m\ddot{z} &= F_z - mg + 2\omega\dot{y}\cos\lambda
\end{aligned}
\tag{1.4.35}
$$

我们不严格求解上述方程，仅以一例定性说明科里奥利力的效应.由上式可见，在北半球科里奥利力的水平分量总是指向运动的右侧，例如当质点自北向南运动时，科里奥利力则指向西方.这种长年累月的作用，使得北半球河流右岸的冲刷甚于左岸，因而比较陡峭.双轨单行铁路的情况也是这样，由于右轨所受到的压力大于左轨，因而磨损较大.南半球的情况相反.

习 题 1

1.1 一个质量为 m 的质点在光滑的水平面上以角速度 ω 做匀速率圆周运动.其向心力是通过一劲度系数为 k 的弹簧提供的.使质点突然有一个很小的径向速度分量，求所引起的径向振动角频率.（提示：用公式(1.2.12)，令 $r=R+\Delta r$，$\dot{\vartheta}=\omega+\Delta\dot{\vartheta}$，求 Δr 满足的振动方程）

答案：$\omega_0=\sqrt{3\omega^2+k/m}$.

1.2 三个点源等距离固定在一个半径为 a 的圆周上，每个点源对质量为 m 的质点的吸引力为

$$
\boldsymbol{F}_i = -k(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) \quad (i=1,2,3)
$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 为质点 m 的位置矢量，$\boldsymbol{r}_i$ 为三个点源的位置矢量，$k>0$ 为常量.求质点的运动方程.（提示：因为 $\boldsymbol{r}_i$ 等距分布，故 $\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2+\boldsymbol{r}_3=0$）

答案：简谐运动，角频率为 $\omega=\sqrt{3k/m}$.

1.3 质量为 m 的质点在力 $\boldsymbol{F}=-k\boldsymbol{r}$ 作用下运动（$k>0$ 为常量）.(1) 证明粒子在平面内运动；(2) 初始条件为 $x=a$，$y=0$，$\dot{x}=0$，$\dot{y}=v_0$，求粒子运动轨迹.（提示：先证明角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 守恒，然后证明 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{J}=0$.）

1.4 已知作用在质点上的力为

$$
\begin{aligned}
F_x &= a_{11}x + a_{12}y + a_{13}z \\
F_y &= a_{21}x + a_{22}y + a_{23}z \\
F_z &= a_{31}x + a_{32}y + a_{33}z
\end{aligned}
$$

其中 a_{ik} 都是常量.(1) 什么条件下作用力是保守力？(2) 当作用力满足保守力条件时，求势函数.（提示：用 $\nabla\times\boldsymbol{F}$ 是否为零判断）

答案：$U=-\frac{1}{2}(a_{11}x^2+a_{22}y^2+a_{33}z^2+2a_{12}xy+2a_{23}yz+2a_{31}xz)$.

1.5 判断下列力场是否为保守力，如果是保守力，求势函数.

(1) $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{a}$ 为常矢量；

(2) $\boldsymbol{F}=a\boldsymbol{r}$，$a$ 为常量；

(3) $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{a}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r})$，$\boldsymbol{a}$ 为常矢量.

（提示：用$\nabla\times\boldsymbol{F}$ 是否为零判断）

答案：(1) 非保守力；(2) 保守力，$U(r)=-ar^2/2$；(3) 保守力，$U(\boldsymbol{r})=-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r})^2/2$.

1.6 一个质量为 m 的质点受到两个力的作用：$\boldsymbol{F}_1=f(r)\boldsymbol{e}_r$，$\boldsymbol{F}_2=-\lambda\boldsymbol{v}$（常量 $\lambda>0$），$\boldsymbol{v}$ 是质点的速度. 若该质点初始时刻对原点的角动量为 $\boldsymbol{J}_0$，求以后对原点的角动量.（提示：取 z 轴为 $\boldsymbol{J}_0$ 方向，质点在 xy 平面内运动）

答案：$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_0\exp(-\lambda t/m)$.

1.7 质量为 m 的质点，受到的作用力为

$$\boldsymbol{F}=-k\frac{\dot{\boldsymbol{r}}\times\boldsymbol{r}}{r^3}$$

证明：(1) 动能守恒；(2) 证明 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{J}+k\boldsymbol{r}/r$ 守恒，其中 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$；(3) 粒子运动轨迹在一个半顶角为 $\alpha=\arccos(k/|\boldsymbol{L}|)$的圆锥面上.（提示：考虑 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{L}=r|\boldsymbol{L}|\cos\alpha$）

1.8 一个质量为 m 的质点束缚在线性势 $U=kr$（k 为常量）之中. (1) 当能量、角动量为多大时，轨道是半径为 R 的圆？(2) 如果质点稍微偏离圆轨道，小振动的角频率是多少？

答案：(1) $E=3kR/2$，$J=mvR=\sqrt{mkR^3}$； (2) $\omega=\sqrt{3k/(mR)}$

1.9 如果作用于质点系的力 $\boldsymbol{F}_i=\boldsymbol{F}_i'+\boldsymbol{f}_i$，其中 $\boldsymbol{F}_i'$是非摩擦力，$\boldsymbol{f}_i$ 是正比于速度的摩擦力，证明"均功"与摩擦力无关.（提示：直接用位力定理）

1.10 质量为 m 的质点受到有心力

$$F=-m\left(\frac{\mu^2}{r^2}+\frac{\nu^2}{r^3}\right)$$

的吸引，其中 μ 和 ν 为常量. 证明运动轨道具有形式

$$r=\frac{a}{1+e\cos k\varphi}$$

（提示：用方程(1.2.16)）

1.11 一个质量为 m 的质点在一个以 Ω（对称方向的恒角速度）旋转的半球形碗（半径为 R）的内表面上运动，粒子与碗表面的摩擦力为 $\boldsymbol{F}=-k\boldsymbol{v}$. (1) 以碗心为原点，写出球坐标中的运动方程；(2) 除碗底外，求还存在一个平衡位置的条件.（提示：球坐标中的速度和加速度为

$$\boldsymbol{v}=\dot{r}\boldsymbol{e}_r+r\dot{\vartheta}\boldsymbol{e}_\vartheta+r\dot{\varphi}\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi$$

$$\boldsymbol{a}=(\ddot{r}-r\dot{\vartheta}^2-r\dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta)\boldsymbol{e}_r+(r\ddot{\vartheta}+2\dot{r}\dot{\vartheta}-r\dot{\varphi}^2\sin\vartheta\cos\vartheta)\boldsymbol{e}_\vartheta$$
$$+(r\ddot{\varphi}\sin\vartheta+2\dot{r}\dot{\varphi}\sin\vartheta+2r\dot{\vartheta}\dot{\varphi}\cos\vartheta)\boldsymbol{e}_\varphi)$$

答案:(2) $\cos\vartheta=g/(R\Omega^2)<1$

1.12 一个物体在北纬40°的地球表面上方高 $h=100\text{m}$ 处落下,计算由于地球自转引起的横向位移.(提示:用方程组(1.4.35);因 $\dot{z}\gg\dot{x},\dot{y}$,略去有关 $\dot{x}$ 和 $\dot{y}$ 的项)

答案:向东偏离 0.017m.

第 2 章　刚体的定点运动

一切宏观物体都可以看作是由许多质点组成的集合体，刚体是特殊的质点组. 首先给出刚体的定义：质点组中任何两点之间的距离不因力的作用而发生改变的物体称为**刚体**. 对 n 个质点组成的物体，有 $3n$ 个自由度，但对于刚体，因任意两质点的距离不变，所以只要确定了刚体内不在一直线上三点的位置，刚体的位置就能确定. 这是因为如果固定了刚体中两点的位置，刚体还可绕着连接这两点的直线转动；如果在刚体中把不与这条直线共线的另一点的位置固定，那么刚体就不能作任何运动了. 既然决定刚体的位置需要 3 个点，似乎刚体的运动有 9 个自由度. 其实不然，因为 3 个点的相对位置不能变化，给出了 3 个约束方程. 因此刚体的运动具有 6 个自由度.

2.1　刚体运动的描述：角速度矢量和 Euler 角

刚体的运动分五类.

平动：刚体运动的每一时刻，刚体内各点的速度和加速度相同，这样的运动与质点运动类似，只要研究刚体质心就可以了，因此有 3 个平动自由度；

定轴转动：刚体运动中有一条直线始终不动，这条直线称为转动轴，有 1 个转动自由度；

平面平行运动：刚体运动时，刚体中任意一点始终在平行于某一固定平面的平面内运动，显然，刚体的运动可分解二部分：某一平面内任意一点 A 的平动（有 2 个平动自由度）；及绕通过 A 点且垂直于固定平面的固定转轴的转动（有一个转动自由度）. 因此共有 3 个自由度；

定点转动：刚体运动时，有一点始终不动，整个刚体围绕着通过这点的某一瞬时轴线转动，必须用 2 个自由度（轴上取任意一点，有 3 个自由度，加上两点间距离不变这个约束条件，因此只要 2 个自由度）才能确定这条轴线在空间的取向，再用 1 个变量确定刚体绕这条轴线的转动，因此共有 3 个转动自由度. 我们主要讨论这种情况；

一般运动：刚体不受任何约束，可以在空间任意运动，分解为质心的平动（3 个平动自由度）与绕通过质心的某一条直线的定点转动（3 个转动自由度），共有 6 个自由度.

角速度矢量：首先介绍描述刚体转动特性的物理量，即**角速度矢量**. 设刚体绕通过定点 O 的某轴线转动一微小角度 $\Delta\vartheta$，在转动轴上截取一有方向的线段 $\Delta\boldsymbol{n}$ 来表示

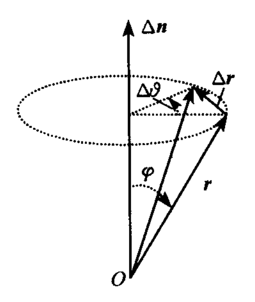


图 2.1.1　角速度矢量

$\Delta\vartheta$ 的数值和方向：$|\Delta\boldsymbol{n}|=\Delta\vartheta$，其指向则由右手螺旋法则决定（如图 2.1.1）. 设 $\boldsymbol{r}$ 为刚体内任一质点 P 在转动前的位置矢量，转动后变为 $\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}$，因为 $\Delta\boldsymbol{r}$ 是无限小量，故 $\Delta\boldsymbol{r}$ 必与包含 $\boldsymbol{r}$ 和 $\Delta\boldsymbol{n}$ 的平面垂直，并且 $|\Delta\boldsymbol{r}|=|\boldsymbol{r}|\sin\varphi\cdot\Delta\vartheta$，或者写成 $|\Delta\boldsymbol{r}|=|\boldsymbol{r}|\cdot|\Delta\boldsymbol{n}|\sin\varphi$，式中 φ 为 $\boldsymbol{r}$ 与 $\Delta\boldsymbol{n}$ 的夹角. 因此

$$\Delta\boldsymbol{r}=\Delta\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r} \tag{2.1.1}$$

定义角速度

$$\boldsymbol{\omega}\equiv\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\Delta\boldsymbol{n}}{\Delta t}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{n}}{\mathrm{d}t} \tag{2.1.2}$$

由式(2.1.1)可以得到质点 P 的线速度矢量为

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r} \tag{2.1.3}$$

可证明 $\boldsymbol{\omega}$ 是一个矢量，即证明 $\boldsymbol{\omega}$ 满足平行四边形加法规则. 事实上，如果质点 P 绕定点 O 转动，同时具有角速度 $\boldsymbol{\omega}_1$ 和 $\boldsymbol{\omega}_2$，那么质点 P 同时具有线速度 $\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{\omega}_1\times\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{v}_2=\boldsymbol{\omega}_2\times\boldsymbol{r}$，而线速度是矢量，因此质点 P 的总线速度为

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_1+\boldsymbol{v}_2=\boldsymbol{\omega}_1\times\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\omega}_2\times\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{\omega}_1+\boldsymbol{\omega}_2)\times\boldsymbol{r} \tag{2.1.4}$$

即质点 P 绕定点 O 转动以角速度$(\boldsymbol{\omega}_1+\boldsymbol{\omega}_2)$转动，同样可以得到质点 P 绕定点 O 转动以角速度$(\boldsymbol{\omega}_2+\boldsymbol{\omega}_1)$转动，因此$(\boldsymbol{\omega}_1+\boldsymbol{\omega}_2)=(\boldsymbol{\omega}_2+\boldsymbol{\omega}_1)$，故 $\boldsymbol{\omega}$ 是一个矢量，它就是刚体在瞬时 t 绕 O 点转动的角速度矢量. 但必须指出：角速度矢量与位置矢量不同，它在空间反演变换下不改变方向，故称为**赝矢量**.

必须注意：$\Delta\vartheta\to 0$ 是一个无限小的转动，可以定义矢量 $\boldsymbol{\omega}$，但有限转动不能定义一个矢量. 我们用图 2.1.2 来说明：在图 2.1.2(a)中，长方形物体绕 z 轴转动 $\pi/2$，再绕 y 轴转动 $\pi/2$ 后变成最后的位形，期间的两次转动操作可用 $A+B$ 表示；在图 2.1.2(b)中，先绕 y 轴转动 $\pi/2$，再绕 z 轴转动 $\pi/2$ 后变成最后的位形，显然两次转动操作可表示为 $B+A$. 由图可见，最后的位形完全不同，故 $A+B\neq B+A$.

Euler 角：为了确定刚体的位置和空间方向，取空间静止的参考系(x_0, y_0, z_0)，

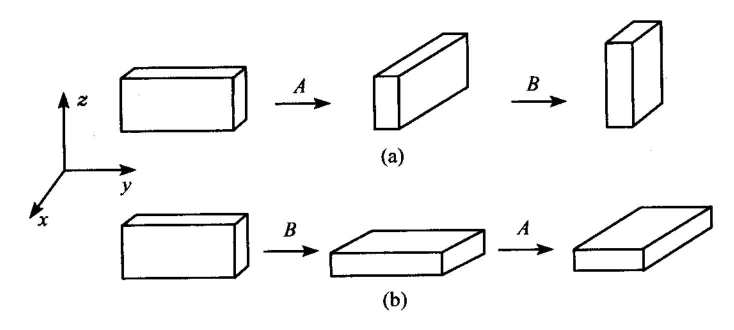


图 2.1.2　刚体的有限角转动

原点为 O_0；取固定在刚体上的坐标系(x,y,z)，原点为定点 O(原则上，可取刚体上的任意一点)，注意：由于刚体的转动，(x,y,z)是非惯性转动坐标系，也称为**本体坐标系**. 定点 O 在坐标(x_0,y_0,z_0)中的位置矢量 $\boldsymbol{R}_0$ 表示刚体的空间位置；空间方向可由坐标轴 x、y 和 z 在坐标系(x_0,y_0,z_0)中的方向决定. 但取三个 Euler 角(φ,ϑ,ψ)更方便. 如图 2.1.3.

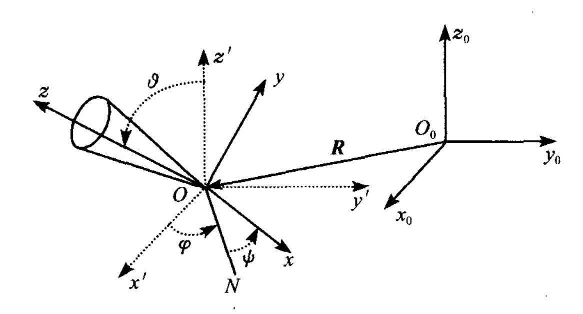


图 2.1.3　刚体的运动

为了说明 Euler 角的几何意义，平移(x_0,y_0,z_0)至刚体形成坐标系(x',y',z')，原点也为定点 O，平面(x',y')与平面(x,y)交线的直线称为**节线**(图 2.1.3 中 $\overline{ON}$). 注意：(x',y',z')的空间方向固定. 于是三个 Euler 角为：节线与轴 x'的夹角 φ；节线与轴 x 的夹角 ψ；极轴 z 与极轴 z'的夹角 ϑ(如图 2.1.3). 以地球绕太阳运动为例：原点 O_0 为太阳，定点 O 为地心，地球绕太阳旋转的轨道平面(x',y')称为**黄道面**；地球的极轴为轴 z，地球上垂直于极轴的平面(x,y)称为**赤道面**；黄道面与赤道面的交线为节线. ϑ 是黄道面法向与地球极轴 z 的夹角，ψ 就是地球的自转角，φ 表示地球对称轴绕黄道面法向的转动. ϑ 和 φ 随时间的变化分别称为**章动**和**进动**，是由于太阳引力产生的力矩引起的，下面进一步讨论.

如果 $\boldsymbol{R}_0\neq0$，则固体既有平动，又有转动，有 6 个自由度；如果 $\boldsymbol{R}_0=0$，则刚体绕定点 O 转动，只有 3 个自由度，即三个 Euler 角. 欧拉角(φ,ϑ,ψ)可由下列三次坐标转动生成，如图 2.1.4.

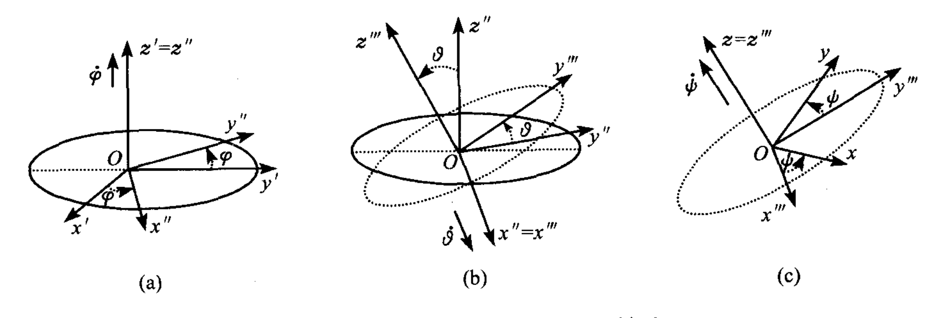


图 2.1.4　定义 Euler 角的三次转动

(1) 如图 2.1.4(a),第 1 次旋转是绕 z'逆时针转动 φ 角,形成新的坐标系(x'',y'',z''),坐标变换矩阵为

$$\boldsymbol{R}_\varphi = \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.1.5}$$

角 φ 称为**进动角**,进动角随时间的变化率 $\dot{\varphi}$ 称为**进动角速度**;

(2) 如图 2.1.4(b),第 2 次旋转是绕 x''逆时针转动 ϑ 角,形成新的坐标系(x''',y''',z'''),坐标变换矩阵为

$$\boldsymbol{R}_\vartheta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ 0 & -\sin\vartheta & \cos\vartheta \end{bmatrix} \tag{2.1.6}$$

角 ϑ 称为**章动角**,章动角随时间的变化率 $\dot{\vartheta}$ 称为**章动角速度**;

(3) 如图 2.1.4(c),第 3 次旋转是绕 z'''(即 $z'''=z$)逆时针转动 ψ 角,形成新的坐标系(x,y,z),坐标变换矩阵为

$$\boldsymbol{R}_\psi = \begin{bmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{2.1.7}$$

角 ψ 称为**自转角**,自转角随时间的变化率 $\dot{\psi}$ 称为**自转角速度**.

显然由坐标系(x',y',z')到(x,y,z),任意矢量 $\boldsymbol{a}$ 的变换为

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{R}_\psi \boldsymbol{a}''' = \boldsymbol{R}_\psi(\boldsymbol{R}_\vartheta \boldsymbol{a}'') = \boldsymbol{R}_\psi \boldsymbol{R}_\vartheta(\boldsymbol{R}_\varphi \boldsymbol{a}') \tag{2.1.8}$$

故整个转动矩阵为

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_\psi \boldsymbol{R}_\vartheta \boldsymbol{R}_\varphi \tag{2.1.9}$$

Euler 角的变化范围

$$0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi;\quad 0 \leqslant \vartheta \leqslant \pi;\quad 0 \leqslant \psi \leqslant 2\pi \tag{2.1.10}$$

设刚体绕通过定点 O 的某一轴线以角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 转动,而 $\boldsymbol{\omega}$ 在固定于刚体上的转动坐标系的分量为 $\omega_x,\omega_y,\omega_z$,则

$$\boldsymbol{\omega} = \omega_x \boldsymbol{e}_x + \omega_y \boldsymbol{e}_y + \omega_z \boldsymbol{e}_z \tag{2.1.11}$$

其中 $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ 是转动坐标系的单位矢量. 在本体坐标系中研究刚体的动力学最方便,希望用刚体在空间取向的 Euler 角(φ,ϑ,ψ)表示本体坐标系中角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 的分量. 显然从(x',y',z')系到(x,y,z)系的转动角速度情况为

$\dot{\varphi}$:沿 z'轴,即 $\boldsymbol{\omega}_\varphi=\dot{\varphi}\boldsymbol{e}'_z$($\boldsymbol{e}'_z$是 z'轴方向的单位矢量);

$\dot{\vartheta}$:沿 x''轴,即 $\boldsymbol{\omega}_\vartheta=\dot{\vartheta}\boldsymbol{e}''_x$($\boldsymbol{e}''_x$是 x''轴方向的单位矢量);

$\dot{\psi}$:沿 z'''轴,即 $\boldsymbol{\omega}_\psi=\dot{\psi}\boldsymbol{e}'''_z$($\boldsymbol{e}'''_z$是 z'''轴方向的单位矢量).

总的角速度为 $\boldsymbol{\omega}=\dot{\varphi}\boldsymbol{e}'_z+\dot{\vartheta}\boldsymbol{e}''_x+\dot{\psi}\boldsymbol{e}'''_z$,写成分量形式且通过转动矩阵统一到($x,y,z$)系

$$\begin{bmatrix}\omega_x\\ \omega_y\\ \omega_z\end{bmatrix}=\boldsymbol{R}\begin{bmatrix}0\\ 0\\ \dot{\varphi}\end{bmatrix}+\boldsymbol{R}_\psi\boldsymbol{R}_\vartheta\begin{bmatrix}\dot{\vartheta}\\ 0\\ 0\end{bmatrix}+\boldsymbol{R}_\psi\begin{bmatrix}0\\ 0\\ \dot{\psi}\end{bmatrix} \tag{2.1.12}$$

上式给出

$$\begin{aligned}\omega_x&=\dot{\varphi}\sin\vartheta\sin\psi+\dot{\vartheta}\cos\psi\\ \omega_y&=\dot{\varphi}\sin\vartheta\cos\psi-\dot{\vartheta}\sin\psi\\ \omega_z&=\dot{\varphi}\cos\vartheta+\dot{\psi}\end{aligned} \tag{2.1.13}$$

通常称为 **Euler 运动学方程**，它用描述刚体在空间取向的 Euler 角(φ,ϑ,ψ)来表示本体坐标系中的角速度矢量(因为刚体动力学方程与本体坐标系中的角速度矢量有关，见 2.3 节)．如果(φ,ϑ,ψ)随时间变化的规律已知，由此容易求出角速度矢量在本体坐标系中的分量.

2.2　惯量张量、转动惯量和转动动能

我们主要讨论刚体的定点转动问题，首先求出动量矩 $\boldsymbol{J}$ 用本体坐标(x,y,z)表示的表达式. 为了方便，设定点 O、本体坐标原点和空间坐标原点三者重合(图 2.1.3 中 $\boldsymbol{R}=0$ 情况)，刚体中第 i 个质点在本体坐标和空间坐标的位置矢量分别为 $\boldsymbol{r}_i$ 和 $\boldsymbol{r}'_i$，因两个坐标系原点重合，故 $\boldsymbol{r}'_i=\boldsymbol{r}_i$. 刚体对 O 点的动量矩为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}&=\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{r}'_i\times m_i\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'_i}{\mathrm{d}t}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{r}_i\times m_i\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right)\\ &=\sum_{i=1}^{n}m_i[\boldsymbol{r}_i\times(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}_i)]=\sum_{i=1}^{n}m_i[\boldsymbol{\omega}r_i^2-\boldsymbol{r}_i(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)]\end{aligned} \tag{2.2.1}$$

对质量连续分布的刚体，动量矩为

$$\boldsymbol{J}=\int_V[\boldsymbol{\omega}r^2-\boldsymbol{r}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r})]\mathrm{d}m \tag{2.2.2}$$

上式表明动量矩的方向一般与角速度的方向不一致. $\boldsymbol{J}$ 在本体坐标系中的分量形式为

$$\begin{aligned}J_x&=I_{xx}\omega_x+I_{xy}\omega_y+I_{xz}\omega_z\\ J_y&=I_{yx}\omega_x+I_{yy}\omega_y+I_{yz}\omega_z\\ J_z&=I_{zx}\omega_x+I_{zy}\omega_y+I_{zz}\omega_z\end{aligned} \tag{2.2.3}$$

其中

$$\begin{aligned}&I_{xx}=\int_V(y^2+z^2)\mathrm{d}m;\quad I_{yy}=\int_V(x^2+z^2)\mathrm{d}m\\ &I_{zz}=\int_V(y^2+x^2)\mathrm{d}m;\quad I_{yz}=I_{zy}=-\int_V yz\,\mathrm{d}m\\ &I_{zx}=I_{xz}=-\int_V xz\,\mathrm{d}m;\quad I_{xy}=I_{yx}=-\int_V xy\,\mathrm{d}m\end{aligned} \tag{2.2.4}$$

写成统一的表达式

$$I_{ij}=\int\left[\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}x_k^2-x_ix_j\right]\mathrm{d}m \tag{2.2.5}$$

显然，刚体中任一点到 x、y、z 轴的距离分别为(y^2+z^2)、(x^2+z^2)和(y^2+x^2)，故 I_{xx}、I_{yy}和 I_{zz}分别称为对 x、y、z 轴的**转动惯量**. 交叉项 I_{yz}、I_{xy}和 I_{xz}含有坐标的乘积，故称为**惯量积**. 由 I_{ik}可以组成实对称矩阵

$$\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}I_{xx} & I_{xy} & I_{xz}\\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz}\\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz}\end{bmatrix} \tag{2.2.6}$$

称为**惯量张量**. 利用上式，方程(2.2.3)可表示为简单的形式

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}} \tag{2.2.7}$$

由上式可知：$\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 的方向不一致由二个因素导致：(1) $\boldsymbol{I}$ 中的非对角元素不为零；(2) 对角元素不等. 问题是能否找到一个本体坐标系，使刚体绕坐标轴转动时 $\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 方向一致呢？即

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}=\lambda\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}} \tag{2.2.8}$$

显然上式是一个矩阵特征值问题，分量形式的方程即为

$$\begin{bmatrix}I_{xx} & I_{xy} & I_{xz}\\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz}\\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\omega_x\\ \omega_y\\ \omega_z\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}\omega_x\\ \omega_y\\ \omega_z\end{bmatrix} \tag{2.2.9}$$

因为 $\boldsymbol{I}$ 是实对称矩阵，存在三个实特征值 λ_1，λ_2 和 λ_3，以及相应的特征矢量 $\boldsymbol{\omega}_1$，$\boldsymbol{\omega}_2$ 和 $\boldsymbol{\omega}_3$. 这三个特征矢量满足方程(2.2.8)，即如果刚体绕这三个方向的转动轴转动，则 $\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 同向，我们称这三个方向为**惯量主轴方向**，沿这三个方向的轴称为**惯量主轴**. 我们选此三个方向为坐标轴的 x，y 和 z 方向，这个坐标系称为(惯量)主**轴坐标系**. 在主轴坐标系内

$$\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}I_{xx} & 0 & 0\\ 0 & I_{yy} & 0\\ 0 & 0 & I_{zz}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & 0\\ 0 & 0 & \lambda_3\end{bmatrix} \tag{2.2.10}$$

因此在惯量主轴方向，J_i 与 $\omega_i(i=x,y,z)$成正比

$$J_x=I_{xx}\omega_x;\quad J_y=I_{yy}\omega_y;\quad J_z=I_{zz}\omega_z \tag{2.2.11}$$

注意：如果刚体不绕惯量主轴方向转动，$\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 还是不在同一个方向，除非 $I_{xx}=I_{yy}=I_{zz}$.

例 2.2.1　求边长为 a 的立方体的惯量张量.

解：　取立方体的一个角为坐标原点 O，三条边为(x,y,z)轴，在这个坐标系内

$$I_{xx}=\rho\int_0^a\int_0^a\int_0^a(y^2+z^2)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=\frac{2}{3}\rho a^5=\frac{2}{3}ma^2=I_{yy}=I_{zz}$$

$$I_{xy}=-\rho\int_0^a\int_0^a\int_0^a xy\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=-\frac{1}{4}\rho a^5=-\frac{1}{4}ma^2=I_{yz}=I_{zx}$$

因此惯量张量为

$$\boldsymbol{I}=\beta\begin{bmatrix}2/3 & -1/4 & -1/4\\ -1/4 & 2/3 & -1/4\\ -1/4 & -1/4 & 2/3\end{bmatrix} \tag{2.2.12}$$

其中 $\beta=ma^2$；$m=\rho a^3$. 假定立方体绕 z 轴旋转，$\boldsymbol{\omega}=\omega\boldsymbol{e}_z$，则动量矩为

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}=\beta\begin{bmatrix}2/3 & -1/4 & -1/4\\ -1/4 & 2/3 & -1/4\\ -1/4 & -1/4 & 2/3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\ \omega\end{bmatrix}$$

$$=\beta\omega\left(-\frac{1}{4}\boldsymbol{e}_x-\frac{1}{4}\boldsymbol{e}_y+\frac{2}{3}\boldsymbol{e}_z\right)$$

显然 $\boldsymbol{\omega}=\omega\boldsymbol{e}_z$ 与 $\boldsymbol{J}$ 不在同一个方向. 为了找到三个惯量主轴，首先求 $\boldsymbol{I}$ 的三个实特征值 λ_1，λ_2 和 λ_3，即解特征方程

$$\det\begin{bmatrix}2/3-\lambda/\beta & -1/4 & -1/4\\ -1/4 & 2/3-\lambda/\beta & -1/4\\ -1/4 & -1/4 & 2/3-\lambda/\beta\end{bmatrix}=0 \tag{2.2.13}$$

容易得到上式的三个解为

$$\lambda_1=\frac{1}{6}\beta,\quad \lambda_2=\lambda_3=\frac{11}{12}\beta \tag{2.2.14}$$

故主轴惯量为 $I_{xx}=\beta/6$；$I_{yy}=I_{zz}=11\beta/12$. 第二步求三个特征矢量 $\boldsymbol{\omega}_1$，$\boldsymbol{\omega}_2$ 和 $\boldsymbol{\omega}_3$，由 $\lambda_1=\beta/6$ 代入方程(2.2.9)得到

$$\begin{bmatrix}2/3-1/6 & -1/4 & -1/4\\ -1/4 & 2/3-1/6 & -1/4\\ -1/4 & -1/4-1/6 & 2/3-1/6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\omega_x\\ \omega_y\\ \omega_z\end{bmatrix}=0 \tag{2.2.15}$$

由这个方程推得：$\omega_x:\omega_y:\omega_z=1:1:1$，即立方体在绕主轴惯量为 $I_{xx}=\beta/6$ 的主轴旋转时，角速度矢量在三个坐标轴上的分量相等. 可见这个主轴就是立方体的对角线. 由于 $I_{yy}=I_{zz}$，另二个主轴只要位于垂直立方体对角线的平面内就可以了.

刚体转动动能：刚体定点转动时的动能为

$$T=\frac{1}{2}\int_V v^2\mathrm{d}m=\frac{1}{2}\int_V\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})\mathrm{d}m=\frac{1}{2}\int_V\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v})\mathrm{d}m$$

$$=\frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\int_V(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v})\mathrm{d}m=\frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}$$

$$=\frac{1}{2}(I_{xx}\omega_x^2+I_{yy}\omega_y^2+I_{zz}\omega_z^2+2I_{yz}\omega_y\omega_z+2I_{zx}\omega_z\omega_x+2I_{xy}\omega_x\omega_y) \tag{2.2.16}$$

如果取坐标系为主轴坐标系，则

$$T=\frac{1}{2}(I_{xx}\omega_x^2+I_{yy}\omega_y^2+I_{zz}\omega_z^2)=\frac{1}{2}\left(\frac{J_x^2}{I_{xx}}+\frac{J_y^2}{I_{yy}}+\frac{J_z^2}{I_{zz}}\right) \tag{2.2.17}$$

动能也可以用绕转动轴的转动惯量（标量）来表示：设角速度矢量与(x,y,z)轴的夹角为(α,β,γ)（注意：在刚体的定点运动中，转动轴与时间有关，为瞬时转动轴），转动轴的方向为$\boldsymbol{n}=(\cos\alpha,\cos\beta,\cos\gamma)$

$$\boldsymbol{\omega}=\omega_x\boldsymbol{e}_x+\omega_y\boldsymbol{e}_y+\omega_z\boldsymbol{e}_z=\omega(\cos\alpha\boldsymbol{e}_x+\cos\beta\boldsymbol{e}_y+\cos\gamma\boldsymbol{e}_z) \tag{2.2.18}$$

代入式(2.2.16)得到

$$\begin{aligned}T=&\frac{1}{2}\omega^2(I_{xx}\cos^2\alpha+I_{yy}\cos^2\beta+I_{zz}\cos^2\gamma\\&+2I_{yz}\cos\beta\cos\gamma+2I_{zx}\cos\alpha\cos\gamma\\&+2I_{xy}\cos\alpha\cos\beta)\equiv\frac{1}{2}I\omega^2\end{aligned} \tag{2.2.19}$$

其中 I 为绕转动轴的转动惯量

$$\begin{aligned}I=&I_{xx}\cos^2\alpha+I_{yy}\cos^2\beta+I_{zz}\cos^2\gamma\\&+2I_{yz}\cos\beta\cos\gamma+2I_{zx}\cos\alpha\cos\gamma+2I_{xy}\cos\alpha\cos\beta\end{aligned} \tag{2.2.20}$$

上式写成矢量形式为

$$I=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} \tag{2.2.21}$$

如转动轴为 x 轴：$\boldsymbol{n}=(1,0,0)$，$I=I_{xx}$；对 I_{yy} 和 I_{zz} 可得到同样的结论. 因此转动惯量张量的对角元素为绕坐标轴转动的转动惯量.

我们也可以直接从定义导出式(2.2.20). 绕转动轴 $\boldsymbol{n}$ 的转动惯量定义为

$$I=\int\rho^2\mathrm{d}m \tag{2.2.22}$$

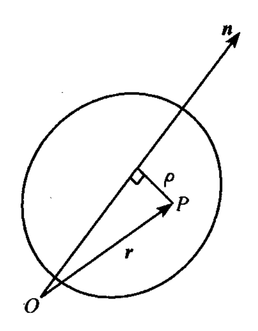


图 2.2.1　P 到转动轴的垂直距离

其中 ρ 为刚体内一点 P 到转动轴的垂直距离，如图 2.2.1. 设刚体内任一点的位置矢量为

$$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z \tag{2.2.23}$$

显然

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}=x\cos\alpha+y\cos\beta+z\cos\gamma=r\cos\vartheta$$

其中 ϑ 是 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{n}$ 的夹角，把

$$\rho^2=(r\sin\vartheta)^2=r^2-r^2\cos^2\vartheta$$

代入式(2.2.22)得到

$$\begin{aligned}I=&\int(r^2-r^2\cos^2\vartheta)\mathrm{d}m\\=&\int[r^2-(x\cos\alpha+y\cos\beta+z\cos\gamma)^2]\mathrm{d}m\end{aligned} \tag{2.2.24}$$

利用关系 $r^2=x^2+y^2+z^2$，$\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$，立即可得到式(2.2.20).

坐标变换：设$(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$是固定在刚体上的另一套本体坐标.

1. 坐标转动：惯量张量满足张量的变换规则，即

$$\bar{I}_{ij}=\sum_{k=1}^{3}\sum_{l=1}^{3}a_{ik}a_{jl}I_{kl} \tag{2.2.25}$$

其中 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}]$是坐标变换矩阵，即

$$\bar{x}_i=\sum_{j=1}^{3}a_{ij}x_j \tag{2.2.26}$$

或者写成矩阵的形式

$$\bar{\boldsymbol{I}}=\boldsymbol{AIA}^{\mathrm{T}} \tag{2.2.27}$$

2. 坐标平移：$\bar{x}_i=x_i+R_i$，在$(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$系中

$$\begin{aligned}\bar{I}_{ij}&=\int\Big[\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}\bar{x}_k^2-\bar{x}_i\,\bar{x}_j\Big]\mathrm{d}m=\int\Big[\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}(x_k+R_k)^2-(x_i+R_i)(x_j+R_j)\Big]\mathrm{d}m\\&=I_{ij}+\int\Big(\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}R_k^2-R_iR_j\Big)\mathrm{d}m+\int\Big[2\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}R_kx_k-(R_ix_j+R_jx_i)\Big]\mathrm{d}m\end{aligned} \tag{2.2.28}$$

假定(x,y,z)坐标的原点为质心(注意这个条件)，即

$$\int x_i\mathrm{d}m=0\quad(i=1,2,3) \tag{2.2.29}$$

于是

$$\bar{I}_{ij}=I_{ij}+\int\Big(\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}R_k^2-R_iR_j\Big)\mathrm{d}m \tag{2.2.30}$$

令

$$M=\int\mathrm{d}m,\quad \sum_{k=1}^{3}R_k^2=R^2 \tag{2.2.31}$$

式(2.2.30)简化成

$$\bar{I}_{ij}=I_{ij}+M(R^2\delta_{ij}-R_iR_j) \tag{2.2.32}$$

称为**广义平行轴定理**.

例 2.2.2 原点为质心的坐标系 z 轴在 xy 平面内平移距离 d 成为 $\bar{z}$，已知绕 z 轴转动的惯量为 I，求绕 $\bar{z}$ 轴转动的惯量 $\bar{I}$.

解： 因平移在 xy 平面内：$R_3=0$，$R_1^2+R_2^2=R^2=d^2$，故

$$\bar{I}=\bar{I}_{33}=I_{33}+M(R^2-R_3R_3)=I+Md^2 \tag{2.2.33}$$

即为**平行轴定理**.

2.3　刚体动力学方程:动量矩定理和 Euler 方程

刚体是特殊的质点组,那么刚体的运动也遵循质点组的运动规律,与一般的质点组不同的是,在本体坐标系内,每个质点的位置矢量不变. 根据刚体的运动情况和本体坐标系原点的选择,分三种情况讨论.

1. 本体坐标系原点为质心:描述刚体的一般运动,可分解为质心的平动与绕通过质心的某一条直线的定点转动. 由方程(1.3.8),刚体质心的运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_\mathrm{c}}{\mathrm{d}t^2}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}=\boldsymbol{F} \tag{2.3.1}$$

式中 m 是刚体的总质量,对质量连续分布的刚体,质心坐标

$$\boldsymbol{r}_\mathrm{c}=\frac{1}{m}\int_V\boldsymbol{r}\mathrm{d}m \tag{2.3.2}$$

式中质量元 $\mathrm{d}m=\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$,$\rho(\boldsymbol{r})$是刚体的密度分布. 由方程(1.4.9),刚体对质心的动量矩定理为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}_\mathrm{c}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{M}_\mathrm{c} \tag{2.3.3}$$

式中 $\boldsymbol{J}_\mathrm{c}$ 和 $\boldsymbol{M}_\mathrm{c}$ 分别是相对于质心的动量矩和外力矩

$$\boldsymbol{J}_\mathrm{c}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i;\quad \boldsymbol{M}_\mathrm{c}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})} \tag{2.3.4}$$

2. 本体坐标系原点为定点 O:描述刚体的定点转动,如图 2.1.3,取空间坐标系(x',y',z')与本体坐标系(x,y,z)的原点重合且为定点 O,则式(2.3.3)同样成立,只要把 $\boldsymbol{J}_\mathrm{c}$ 和 $\boldsymbol{M}_\mathrm{c}$ 改成相对于定点 O 的动量矩 $\boldsymbol{J}$ 和外力矩 $\boldsymbol{M}$. 事实上,由式(1.4.26),刚体上第 i 个质点在空间坐标系(x',y',z')中的加速度为

$$\boldsymbol{a}_i'=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)-\omega^2\boldsymbol{r}_i \tag{2.3.5}$$

得到上式,已经利用了刚体的特殊性,即在本体坐标内,质点的位置矢量不变 $\dot{x}_i=\dot{y}_i=\dot{z}_i=0$. 于是第 i 个质点的运动方程为

$$m_i\boldsymbol{a}_i'=m_i\left[\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)-\omega^2\boldsymbol{r}_i\right]=\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}+\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{i})} \tag{2.3.6}$$

两边矢乘 $\boldsymbol{r}_i$ 并且对所有质点求和得到

$$\sum_{i=1}^{n}m_i[\boldsymbol{r}_i\times(\dot{\boldsymbol{\omega}}\times\boldsymbol{r}_i)+(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)]=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i^{(\mathrm{e})}\equiv\boldsymbol{M} \tag{2.3.7}$$

注意:已利用了合内力矩为零的条件. 上式可改写成

$$\sum_{i=1}^{n}m_i[\dot{\boldsymbol{\omega}}r_i^2+(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{\omega})-(\boldsymbol{r}_i\cdot\dot{\boldsymbol{\omega}})\boldsymbol{r}_i]=\boldsymbol{M} \tag{2.3.8}$$

另一方面，由式(2.2.1)，在空间固定的惯性坐标系(x',y',z')内，动量矩矢量$\boldsymbol{J}$的时间变化率为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}=\sum_{i=1}^{n}m_i\left[\dot{\boldsymbol{\omega}}r_i^2-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)-\boldsymbol{r}_i(\dot{\boldsymbol{\omega}}\cdot\boldsymbol{r}_i)-\boldsymbol{r}_i\left(\boldsymbol{\omega}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right)\right]$$

$$=\sum_{i=1}^{n}m_i[\dot{\boldsymbol{\omega}}r_i^2+(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{\omega})-(\dot{\boldsymbol{\omega}}\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i] \quad (2.3.9a)$$

利用矢量恒等式$\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}_i)=\boldsymbol{r}_i\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\omega})=0$，上式简化成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}=\sum_{i=1}^{n}m_i[\dot{\boldsymbol{\omega}}r_i^2+(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{\omega})-(\dot{\boldsymbol{\omega}}\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i] \quad (2.3.9b)$$

注意：刚体中r_i^2不随时间变化，但相对于空间坐标，由式(1.4.20)或(2.1.3)

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}_i \quad (2.3.10)$$

比较式(2.3.8)和(2.3.9b)，显然有关系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{M} \quad (2.3.11)$$

但上式中$\boldsymbol{J}$和$\boldsymbol{M}$是相对于定点O的动量矩和外力矩. 因为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{J}&=\sum_{i=1}^{n}m_i[(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{\omega})r_i^2-(\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}_i)(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)]\\&=\sum_{i=1}^{n}m_i[(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)]\end{aligned} \quad (2.3.12)$$

式(2.3.9b)也可以写成

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}&=\sum_{i=1}^{n}m_i[\dot{\boldsymbol{\omega}}r_i^2-(\dot{\boldsymbol{\omega}}\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i]+\sum_{i=1}^{n}m_i[(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{\omega})]\\&=\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{J}\end{aligned} \quad (2.3.13)$$

其中

$$\frac{\mathrm{d}^*\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t}\equiv\sum_{i=1}^{n}m_i[\dot{\boldsymbol{\omega}}r_i^2-(\dot{\boldsymbol{\omega}}\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i]=\boldsymbol{I}\cdot\dot{\boldsymbol{\omega}}^{\mathrm{T}} \quad (2.3.14)$$

是由于角速度矢量随时间变化引起的动量矩时间变化率. 式(2.3.13)与式(1.4.22)是一致的.

3. 本体坐标系原点为刚体内任意点A：本体坐标系与空间坐标系的原点不重合，相对于空间坐标系，任意点A有一个加速度$\boldsymbol{a}_A$，由式(1.4.26)，刚体上第i个质点在空间坐标系(x',y',z')中的加速度为

$$\boldsymbol{a}_i'=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}_i)-\omega^2\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{a}_A \quad (2.3.15)$$

式(2.3.8)变成

$$\sum_{i=1}^{n} m_i[\dot{\omega} r_i^2 + (\omega \cdot r_i)(r_i \times \omega) - (r_i \cdot \dot{\omega}) r_i] = M - \sum_{i=1}^{n} m_i r_i \times a_A \tag{2.3.16}$$

即方程右边的力矩为外力矩与惯性力矩之和. 相应地,式(2.3.11)变成

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} = M - \sum_{i=1}^{n} m_i r_i \times a_A \tag{2.3.17}$$

显然当 A 点取质心时, $\sum m_i r_i = 0$,上式回到式(2.3.3).

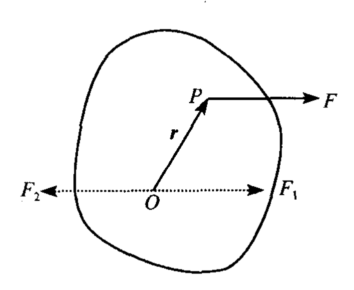


图 2.3.1　刚体上任一点的作用力

必须注意:作用在刚体上的诸外力可能是不共点的,但可把它们平移到质心(或者定点 O),然后求合力. 如图 2.3.1,假定作用在刚体上任一点 P 的外力为 $\boldsymbol{F}$,在质心 C(或定点 O)添加两个外力 $\boldsymbol{F}_1$ 和 $\boldsymbol{F}_2$,两外力的大小与 $\boldsymbol{F}$ 一样,但方向相反. 因为 $\boldsymbol{F}_1$ 和 $\boldsymbol{F}_2$ 实际上相互抵消,所以这种添加是可以的. 因此作用在刚体上任一点 P 的外力 $\boldsymbol{F}$ 可看成作用在刚体上的三个力:$\boldsymbol{F}_1$ 相当于由 $\boldsymbol{F}$ 平移而来,而 $\boldsymbol{F}$ 和 $\boldsymbol{F}_2$ 大小相等且方向相反,形成力偶,对质心 C(或定点 O)的力矩为 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$.

所以作用在刚体上的一个外力可以等效成:作用在质心 C(或定点 O)的外力与相对于质心 C(或定点 O)的一个力偶. 当 $\boldsymbol{F}=0$ 和 $\boldsymbol{M}=0$ 时,刚体处于平衡状态. 注意:刚体的平衡必须同时满足这两个条件.

在主轴坐标系内

$$\begin{aligned} J &= I_{xx}\omega_x e_x + I_{yy}\omega_y e_y + I_{zz}\omega_z e_z \\ \omega &= \omega_x e_x + \omega_y e_y + \omega_z e_z \\ M &= M_x e_x + M_y e_y + M_z e_z \end{aligned} \tag{2.3.18}$$

代入方程(2.3.11)得到刚体定点转动的动力学方程

$$\begin{aligned} I_{xx}\dot{\omega}_x - (I_{yy} - I_{zz})\omega_y\omega_z &= M_x \\ I_{yy}\dot{\omega}_y - (I_{zz} - I_{xx})\omega_z\omega_x &= M_y \\ I_{zz}\dot{\omega}_z - (I_{xx} - I_{yy})\omega_x\omega_y &= M_z \end{aligned} \tag{2.3.19}$$

称为 **Euler 动力学方程**. 注意:Euler 方程是非线性方程,知道 $\boldsymbol{M}$ 求 $\boldsymbol{\omega}$ 是非常困难的. 反过来,已知 $\boldsymbol{\omega}$,求 $\boldsymbol{M}$ 比较容易. 如刚体作匀角速度转动

$$\dot{\omega}_x = \dot{\omega}_y = \dot{\omega}_z = 0 \tag{2.3.20}$$

则力矩为

$$\begin{aligned} M_x &= (I_{zz} - I_{yy})\omega_y\omega_z \\ M_y &= (I_{xx} - I_{zz})\omega_z\omega_x \\ M_z &= (I_{yy} - I_{xx})\omega_x\omega_y \end{aligned} \tag{2.3.21}$$

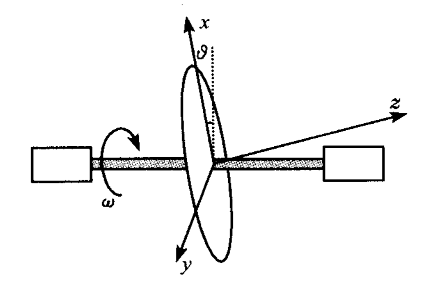


图 2.3.2 薄圆盘法向与转动轴不一致

例 2.3.1 如图 2.3.2,均匀薄圆盘质量为 m,半径为 R,薄圆盘法向应该与转动轴一致.但安装时,有一个小误差,使薄圆盘法向与转动轴有小夹角 ϑ,机器转速为 ω,轴承相距 l.求转动轴两端轴承对轴的作用力.

解: 取圆盘法向为 z 轴,主转动惯量为 $I_{zz}=mR^2/2$,圆盘上过圆心且与转动轴垂直的方向为 y 轴,转动惯量为

$$I_{xx}=I_{yy}=\frac{1}{4}mR^2 \tag{2.3.22}$$

角速度矢量 $\boldsymbol{\omega}$ 在(x,y,z)坐标内为

$$\boldsymbol{\omega}=-\omega\sin\vartheta\boldsymbol{e}_x+0\boldsymbol{e}_y+\omega\cos\vartheta\boldsymbol{e}_z \tag{2.3.23}$$

由方程(2.3.21)

$$\begin{aligned}M_x&=(I_{zz}-I_{yy})\omega_y\omega_z=0\\M_y&=(I_{xx}-I_{zz})\omega_z\omega_x=-\frac{mR^2\omega^2}{4}\sin\vartheta\cos\vartheta\\M_z&=(I_{yy}-I_{xx})\omega_x\omega_y=0\end{aligned} \tag{2.3.24}$$

力矩 M_y 由两端轴承对轴的作用力产生,故

$$F_x=\frac{M_y}{l}=-\frac{mR^2}{4l}\omega^2\sin\vartheta\cos\vartheta \tag{2.3.25}$$

取 $\vartheta=1°$,$\omega=400\pi/\mathrm{s}$,$R=0.2\mathrm{m}$,$m=40\mathrm{kg}$,和 $l=1\mathrm{m}$,$F_x=-11022\mathrm{N}$,这是一个很大的数字.

2.4 刚体的定点运动、动平衡的稳定性

在重力作用下,刚体的定点运动方程在下列两种情况下比较简单:①Euler 情况,刚体因惯性而运动,重力通过定点 O,即刚体的重心 G 与定点 O 重合(故重力对 O 点的力矩为零),刚体在无外力矩作用下,依靠惯性转动,称为**动平衡**;②Lagrange情况,刚体的重心位于对称轴上,但不与定点 O 重合,这种在重力作用下迅速绕对称轴转动的刚体叫回转仪或陀螺,也称为重刚体.

Euler 情况:在无外力矩作用情况下,刚体的转动轴和角速度也会变化,除非转动轴恰好是惯量主轴.当 $\boldsymbol{M}=0$ 时,$\boldsymbol{J}=$常量,但不能说 $\boldsymbol{\omega}$ 也是常量,因为 $\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 的方向一般不一致.

首先考虑对称刚体的情况,设刚体具有通过定点的对称轴,取对称轴方向为 z 方向,与对称轴垂直的所有直线都是惯量主轴,任取相互垂直的两条直线为 x 和 y 轴.由于对称性 $I_{xx}=I_{yy}\equiv I_1$,于是欧拉动力学方程(2.3.19)简化为

$$
\begin{aligned}
&I_1\dot{\omega}_x-(I_1-I_3)\omega_y\omega_z=0\\
&I_1\dot{\omega}_y-(I_3-I_1)\omega_z\omega_x=0\\
&I_3\dot{\omega}_z=0
\end{aligned}
\tag{2.4.1}
$$

其中 $I_3\equiv I_{zz}$. 由第三式

$$
\omega_z=\Omega\quad(\Omega\text{ 为常量})\tag{2.4.2}
$$

即 $\boldsymbol{\omega}$ 在对称轴上的投影为常量. 又由第一、二式得到

$$
\dot{\omega}_x+\left(\frac{I_3-I_1}{I_1}\right)\Omega\omega_y=0;\quad \dot{\omega}_y-\left(\frac{I_3-I_1}{I_1}\right)\Omega\omega_x=0\tag{2.4.3}
$$

容易得到上式的解为

$$
\begin{aligned}
\omega_x&=\omega_0\cos\left[\left(\frac{I_3-I_1}{I_1}\right)\Omega t+\varepsilon\right]\\
\omega_y&=\omega_0\sin\left[\left(\frac{I_3-I_1}{I_1}\right)\Omega t+\varepsilon\right]
\end{aligned}
\tag{2.4.4}
$$

式中 ω_0 和 ε 是积分常数,由初始条件决定. 因此总角速度 $\sqrt{\Omega^2+\omega_0^2}$ 是常量且角速度矢量在 z 方向的投影保持不变,故总角速度的方向绕对称轴 Oz 作匀速转动,瞬时转轴在空间描出一个圆锥,如图 2.4.1.

此外,由于刚体的重心 G 与定点 O 重合,势能没有变化,又不存在其他外力作功,故刚体的动能不变,由式(2.2.16)

$$
T=\frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}=\text{常量}\tag{2.4.5}
$$

因 $\boldsymbol{J}=$常量,设 $\boldsymbol{J}$ 方向为空间坐标的 z' 轴方向,则上式要求角速度矢量在 $\boldsymbol{J}$ 方向的投影也为常量,而总角速度的大小不变,故 $\boldsymbol{\omega}$ 围绕 $\boldsymbol{J}$ 也在空间描出一个圆锥. 因此,一方面 $\boldsymbol{\omega}$ 围绕刚体的对称轴 Oz 转动,在空间描出一个圆锥,称为**本体圆锥**;另一方面,$\boldsymbol{\omega}$ 又围绕 $\boldsymbol{J}$ 也在空间描出一个圆锥,称为**空间圆锥**. 两个圆锥的切线方向即为 $\boldsymbol{\omega}$ 方向. 注意:空间圆锥固定不动,本体圆锥在空间圆锥的锥面上无滑动滚动,如图 2.4.2.

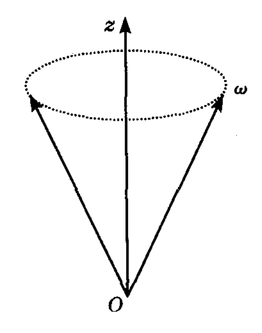


图 2.4.1　瞬时转轴围绕对称轴描出一个圆锥

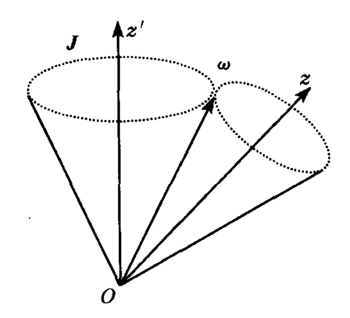


图 2.4.2　空间圆锥和本体圆锥

一个有实际意义的例子是地球的自转：地球是扁平球体，定点为地球的中心．忽略太阳和月球的引力产生的力矩，外力矩为零．取地球中心为坐标原点，地球的对称轴为 z 轴．由以上讨论，地球的自转轴，即 $\boldsymbol{\omega}$ 的方向（也叫**天文地轴**）并不与对称轴（叫**地理地轴**）重合，天文地轴围绕地理地轴转动的周期为

$$T=\frac{2\pi I_1}{(I_3-I_1)\Omega} \tag{2.4.6}$$

地球的 $I_1/(I_3-I_1)\approx 300$，而 $2\pi/\Omega=1$ 天，故 $T\approx 300$ 天．

对非对称刚体，设坐标系方向为惯量主轴方向，Euler 动力学方程为

$$\begin{aligned}
I_{xx}\dot{\omega}_x-(I_{yy}-I_{zz})\omega_y\omega_z&=0\\
I_{yy}\dot{\omega}_y-(I_{zz}-I_{xx})\omega_z\omega_x&=0\\
I_{zz}\dot{\omega}_z-(I_{xx}-I_{yy})\omega_x\omega_y&=0
\end{aligned} \tag{2.4.7}$$

以上三式分别乘 ω_x，ω_y 和 ω_z 并且相加得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[I_{xx}\omega_x^2+I_{yy}\omega_y^2+I_{zz}\omega_z^2]=0 \tag{2.4.8}$$

即

$$\frac{1}{2}[I_{xx}\omega_x^2+I_{yy}\omega_y^2+I_{zz}\omega_z^2]\equiv T\quad (T\text{ 为常量}) \tag{2.4.9}$$

上式实际上表示刚体的动能守恒．

另一方面，方程(2.4.7)三式分别乘 $I_{xx}\omega_x$，$I_{yy}\omega_y$ 和 $I_{zz}\omega_z$ 并相加得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[(I_{xx}\omega_x)^2+(I_{yy}\omega_y)^2+(I_{zz}\omega_z)^2]=0 \tag{2.4.10}$$

即

$$(I_{xx}\omega_x)^2+(I_{yy}\omega_y)^2+(I_{zz}\omega_z)^2=J^2\quad (J^2\text{ 为常量}) \tag{2.4.11}$$

实际上表示刚体的动量矩守恒．由上式和方程(2.4.9)可解出 ω_x 和 ω_y

$$\begin{aligned}
\omega_x^2&=\frac{I_{zz}(I_{zz}-I_{yy})\omega_z^2+2I_{yy}T-J^2}{I_{xx}(I_{yy}-I_{xx})}\\
\omega_y^2&=\frac{I_{zz}(I_{xx}-I_{zz})\omega_z^2+2I_{xx}T-J^2}{I_{yy}(I_{yy}-I_{xx})}
\end{aligned} \tag{2.4.12}$$

上二式代入方程(2.4.7)第三式，就可以得到关于 ω_z 的微分方程，而且这个方程是可分离的．我们不进一步讨论，只是指出：非对称刚体的运动比对称刚体的运动更复杂一点而已，没有本质上的区别．这时瞬时转轴在空间描出的锥面不是一个简单的圆锥．

动平衡的稳定性：下面我们来分析刚体在无外力矩作用下，绕惯量主轴转动的稳定性问题．设刚体绕惯量主轴 z 以 ω_z 转动，但有小的偏移，即 ω_x，$\omega_y\ll\omega_z$，Euler 方程为

$$I_{xx}\dot{\omega}_x-(I_{yy}-I_{zz})\omega_y\omega_z=0$$

$$
\begin{aligned}
I_{yy}\dot{\omega}_y-(I_{zz}-I_{xx})\omega_z\omega_x&=0\\
I_{zz}\dot{\omega}_z-(I_{xx}-I_{yy})\omega_x\omega_y&=0
\end{aligned}
\tag{2.4.13}
$$

因 ω_x，ω_y 是小量，由第三式 $I_{zz}\dot{\omega}_z\approx0$，因此 $\omega_z\approx\Omega$（Ω 为常量）. 由第一和第二式

$$
\ddot{\omega}_x+\left[\frac{(I_{zz}-I_{xx})(I_{zz}-I_{yy})}{I_{xx}I_{yy}}\Omega^2\right]\omega_x=0 \tag{2.4.14}
$$

$$
\ddot{\omega}_y+\left[\frac{(I_{zz}-I_{xx})(I_{zz}-I_{yy})}{I_{xx}I_{yy}}\Omega^2\right]\omega_x=0 \tag{2.4.15}
$$

因此，如果 $I_{zz}>I_{xx}, I_{yy}$，转动是稳定的；如果 $I_{zz}<I_{xx}, I_{yy}$，转动也是稳定的；但如果 I_{zz} 不大不小，在 I_{xx} 和 I_{yy} 之间，上式括号内为负，ω_x 和 ω_y 的解存在指数发散项，转动就不稳定.

同样可得：如果刚体绕惯量主轴 x 以 $\omega_x\approx\Omega$（Ω 为常量）转动，稳定性条件为 $I_{xx}>I_{yy}, I_{zz}$ 或者 $I_{xx}<I_{yy}, I_{zz}$；如果刚体绕惯量主轴 y 以 $\omega_y\approx\Omega$（Ω 为常量）转动，稳定性条件为 $I_{yy}>I_{xx}, I_{zz}$ 或者 $I_{yy}<I_{xx}, I_{zz}$. 因此得到结论：主转动惯量最大或者最小的惯量主轴是稳定转动轴.

Lagrange 情况：刚体的重心位于对称轴上，重心到定点 O 的距离为 l. 在空间坐标系（x'，y'，z'）内，重力的表达式为

$$
\boldsymbol{F}=-mg\boldsymbol{e}'_z \tag{2.4.16}
$$

因此在本体坐标系内重力的分量表达式为

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{F}&=-mg\boldsymbol{R}\boldsymbol{e}'_z=-mg\boldsymbol{R}(0,0,1)^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{R}_\psi\boldsymbol{R}_\vartheta\boldsymbol{R}_\varphi(0,0,1)^{\mathrm{T}}\\
&=-mg(\sin\vartheta\sin\psi,\sin\vartheta\cos\psi,\cos\vartheta)^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
\tag{2.4.17}
$$

故重力矩为

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{M}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}&=-mg(0,0,l)\times(\sin\vartheta\sin\psi,\sin\vartheta\cos\psi,\cos\vartheta)\\
&=-mgl(-\sin\vartheta\cos\psi,\sin\vartheta\sin\psi,0)
\end{aligned}
\tag{2.4.18}
$$

由 Euler 动力学方程(2.3.19)且考虑对称情况 $I_{xx}=I_{yy}\equiv I_1$ 和 $I_3=I_{zz}$，得到

$$
\begin{aligned}
I_1\dot{\omega}_x-(I_1-I_3)\omega_y\omega_z&=mgl\sin\vartheta\cos\psi\\
I_1\dot{\omega}_y-(I_3-I_1)\omega_z\omega_x&=-mgl\sin\vartheta\sin\psi\\
I_3\dot{\omega}_z&=0
\end{aligned}
\tag{2.4.19}
$$

第三式积分并利用式(2.1.13)得到

$$
I_3\omega_z=I_3(\dot{\varphi}\cos\vartheta+\dot{\psi})=J_z\quad(J_z\text{ 为常量}) \tag{2.4.20}
$$

这表明刚体对称轴方向的角速度分量不变，动量矩分量 J_z 守恒. 分别用 ω_x 和 ω_y 乘式(2.4.19)的前二个方程，然后相加且利用式(2.1.13)得到

$$
I_1\omega_x\dot{\omega}_x+I_1\omega_y\dot{\omega}_y+I_3\omega_z\dot{\omega}_z=mgl\dot{\vartheta}\sin\vartheta \tag{2.4.21}
$$

上式积分

$$
\frac{1}{2}(I_1\omega_x^2+I_1\omega_y^2+I_3\omega_z^2)+mgl\cos\vartheta=E \tag{2.4.22}
$$

其中 E 是积分常数.这实际上是刚体的能量守恒方程.把式(2.4.20)代入上式且利用式(2.1.13)得到

$$I_1(\dot{\vartheta}^2+\dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta)+J_z^2/I_3=2(E-mgl\cos\vartheta) \tag{2.4.23}$$

上式和式(2.4.20)就是求得的二个运动积分.从方程(2.4.19)还可以得到另一个运动积分,但可直接从物理条件上求得.事实上,重力的方向与空间坐标 z' 平行,因此在空间坐标中,$J_{z'}$ 应该守恒.在本体坐标中

$$\boldsymbol{J}=I_1\omega_x\boldsymbol{e}_x+I_1\omega_y\boldsymbol{e}_y+I_3\omega_z\boldsymbol{e}_z \tag{2.4.24}$$

则在空间坐标中

$$\boldsymbol{J}'=\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{R}_{\varphi}^{-1}\boldsymbol{R}_{\vartheta}^{-1}\boldsymbol{R}_{\psi}^{-1}\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}} \tag{2.4.25}$$

由此不难求得另一个运动积分(习题 2.13)

$$J_{z'}=I_1\dot{\varphi}\sin^2\vartheta+J_z\cos\vartheta=\text{常量} \tag{2.4.26}$$

顺便提一下:在例 5.3.3 中,我们很容易就得到了这三个运动积分.

我们不进一步对方程(2.4.20)、(2.4.23)和(2.4.26)求解.仅指出:①ϑ 角随时间变化,但限制在某一区域($\vartheta_2\leqslant\vartheta\leqslant\vartheta_1$),刚体对称轴的这种"纬度"变化称为**章动**(z 轴上下颠动);②φ 角随时间变化,刚体对称轴的这种"经度"变化称为**进动**(z 轴绕空间坐标 z' 轴转动).可见外力矩不为零将引起刚体的进动和章动(只要 $\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 不在同一直线上).

习 题 2

2.1 某瞬时刚体绕通过坐标原点的某轴转动,刚体上一点 $M_1(1,0,1)$ 的速度大小为 $v_1=4\text{m/s}$,它与 x 轴所成的角 $\alpha_1=45°$;另一点 $M_2(3,4,0)$ 的速度 v_2,它与 x 轴所成的角 α_2 且 $\cos\alpha_2=-0.8$.求此刚体的角速度矢量.

答案:$\boldsymbol{\omega}=\sqrt{2}\left(\frac{3}{2}\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_y+\frac{3}{2}\boldsymbol{e}_z\right)$.

2.2 一个力系由三个力组成:

$\boldsymbol{F}_1=3\boldsymbol{e}_x+2\boldsymbol{e}_y+a\boldsymbol{e}_z$ 作用于原点;

$\boldsymbol{F}_2=-\boldsymbol{e}_x+3\boldsymbol{e}_y-2\boldsymbol{e}_z$ 作用于(2,1,0)点;

$\boldsymbol{F}_3=2\boldsymbol{e}_x-\boldsymbol{e}_y+5\boldsymbol{e}_z$ 作用于(0,−1,−2)点.

求 a 使三个力可等效于一个单力,该等效的单力作用点在何处?(提示:考虑对原点 O 的力矩,设单力作用点 O' 的位置矢量为 $\boldsymbol{r}$,它对原点 O 的力矩为 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$,既然要三个力的合力等效于一个单力 $\boldsymbol{F}$,那么 $\boldsymbol{F}$ 与 $\boldsymbol{M}$ 一定垂直(注意:有多个力作用时,合力矩方向与合力方向不一定垂直),即 $\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{F}=0$)

答案:$a=1$,$\boldsymbol{F}$ 作用点 O' 的位置矢量为 $\boldsymbol{r}=3(\boldsymbol{e}_x-2\boldsymbol{e}_y+\boldsymbol{e}_z)/4$.

2.3 证明刚体上任何两点的速度在它们连线上的投影相等.(提示:刚体上任

何一点的速度为 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_c+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}$)

2.4　两个均质金属圆盘具有相同的质量 M 和相同的厚度 t，密度分别为 ρ_1 和 ρ_2. 如果 $\rho_1>\rho_2$，哪个圆盘的转动惯量大？(提示：比较三种情况：(1) 转动轴通过圆心且垂直于盘面；(2) 转动轴通过一条半径之中点的垂直轴；(3) 转动轴与通过圆心的垂直轴有夹角，方向矢量为 $\boldsymbol{n}=(\sin\vartheta\cos\varphi,\sin\vartheta\sin\varphi,\cos\vartheta)$)

答案：$I_1<I_2$.

2.5　已知一个均质立方体对于通过其质心和一个面中心的轴的转动惯量为 I_0，求对通过质心和一个角的轴的转动惯量.(提示：取坐标原点位于质心，通过三个面中心的轴为 x,y,z 轴，考虑通过质心的任意轴)

答案：$I=I_0$.

2.6　一个系统由 3 个质点组成：位于 $(a,-a,a)$ 的质点的质量为 $4m$；位于 $(-a,a,a)$ 的质点的质量为 $3m$；位于 (a,a,a) 的质点的质量为 $2m$. 设定点为原点. 求惯量张量的表达式；求通过原点、单位方向矢量为 $\boldsymbol{n}=(\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_y)/\sqrt{2}$ 的轴的转动惯量.

答案：$\boldsymbol{I}=ma^2\begin{bmatrix}18 & 5 & -3\\ 5 & 18 & -1\\ -3 & -1 & 18\end{bmatrix}$；　$I=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}=23ma^2$.

2.7　四个质量为 m 的质点位于 xOy 平面，坐标分别为 $(a,0)$、$(-a,0)$、$(0,2a)$ 和 $(0,-2a)$. 它们分别通过质量可以忽略不计的轻杆连接. 定点为原点. 求：(1) 惯量张量；(2) 绕通过原点且与 x,y 和 z 轴夹角都相等的轴的转动惯量；(3) 某时刻转动轴为(2)的轴，求此时刚体对原点的角动量以及与转动轴的夹角.(提示：$\boldsymbol{n}=\cos\alpha\boldsymbol{e}_x+\cos\beta\boldsymbol{e}_y+\cos\gamma\boldsymbol{e}_z$，$\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$，$\alpha=\beta=\gamma$，$\omega=\frac{1}{\sqrt{3}}(\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_y+\boldsymbol{e}_z)$，$J\cos\vartheta=\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}$)

答案：(1) $\boldsymbol{I}=ma^2\begin{bmatrix}8 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 10\end{bmatrix}$；　(2) $I=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{I}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}=\frac{20}{3}ma^2$.

2.8　对于三个相互垂直的轴：(1) 证明对任一个轴的转动惯量都不能超过对另两个轴的转动惯量之和；(2) 如果刚体是位于 xOy 平面的薄板，证明 $I_{zz}=I_{xx}+I_{yy}$.(提示：用 I_{xx}，I_{yy} 和 I_{zz} 的定义)

2.9　在空间有一刚体，所有外界影响可忽略(包括重力).(1) 用牛顿力学证明角动量守恒；(2) 假定刚体的质心在一个惯性系中静止，它的旋转轴一定要有一个固定的方向吗？(提示：牛顿方程为 $m_i\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2}=\sum\limits_{j\neq i}\boldsymbol{F}_{ij}^{(\mathrm{i})}$，第三定律：$\boldsymbol{F}_{ij}^{(\mathrm{i})}=-\boldsymbol{F}_{ji}^{(\mathrm{i})}$)

答案：$\boldsymbol{J}$ 一般不与 $\boldsymbol{\omega}$ 同方向. 只有绕惯量主轴转动时，$\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{\omega}$ 同方向，此时因为

$\boldsymbol{J}$ 守恒，故转动轴有固定方向.

2.10　均匀长方形薄板 $a\times b$，质量为 m，以匀角速度 ω_0 绕其对角线 AB 转动，求 A 和 B 处轴承上的动反作用力.（提示：与例 2.3.1 类似）

2.11　对称刚体作无外力矩定点运动，证明：动量矩 $\boldsymbol{J}$、角速度矢量 $\boldsymbol{\omega}$ 和对称轴三者共面.（提示：取对称轴为 z 方向，只要证明 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{e}_z$ 与 $\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{e}_z$ 方向相同）

2.12　一个刚体围绕其质心做定点自由转动，主转动惯量 $I_1>I_2>I_3$. 若开始时 $\omega_{z0}>0$，$\omega_{x0}<0$，且 $J^2=2I_2T$，其中 J 是对固定点的角动量，T 是动能.（1）证明角速度矢量的三个分量为

$$\omega_x=-\frac{J}{I_2}\sqrt{\frac{I_2(I_2-I_3)}{I_1(I_1-I_3)}}\operatorname{sech}\tau;\quad \omega_z=\frac{J}{I_2}\sqrt{\frac{I_2(I_1-I_2)}{I_3(I_1-I_3)}}\operatorname{sech}\tau$$

$$\omega_y=\frac{J}{I_2}\tanh\tau;\quad \tau=t\frac{J}{I_2}\sqrt{\frac{(I_1-I_2)(I_2-I_3)}{I_1I_3}}$$

（2）当 $t\to\infty$ 时，将发生什么情况？（提示：由动能和动量矩守恒方程（2.4.9）和（2.4.11），从 $J^2=2I_2T$ 得到 ω_x 与 ω_z 的关系；再从方程（2.4.9）得到 ω_y 与 ω_z 的关系，代入方程（2.4.7）第三式，得到 ω_z 满足的方程）

答案：当 $t\to\infty$ 时，$\omega_x\to0$，$\omega_z\to0$，$\omega_y\to J/I_2$ 刚体绕主转动惯量居中的轴以恒定角速度 J/I_2 转动.

2.13　由方程（2.4.25），证明式（2.4.26）.（提示：注意利用式（2.1.13））

第3章　弹性体中的场和波

在前两章中，研究的是质点和刚体组成的系统. 质点和刚体是实际物体的抽象模型，如果问题不涉及转动，就可以把实际物体抽象成质点，如果涉及转动，但可以忽略物体的形状变化以及由于物体形状变化引起的物体内部作用力的变化，仅仅研究物体的整体运动，那么把实际物体抽象成刚体. 但如果物体的形状变化不能忽略，就必须把它作为变形体来处理. 变形体有二类：一类具有保持一定大小和形状的趋势，在力的作用下发生形变，外力撤消后又恢复原状，这一类叫**弹性体**；另一类完全没有固定的形状，叫**流体**，我们将在下章讨论. 本章主要讨论弹性体的描述方法和基本性质.

3.1　弹性体中的应变和应力张量

我们知道 n 个质点最多有 $3n$ 个自由度，刚体只有 6 个自由度，但对弹性体，质点是连续分布的，必须用无限多个自由度才能描述. 原则上，我们可以用质点组力学的描述方法，但已经没有实际意义了. 因此必须寻找新的方法来描述弹性体的运动.

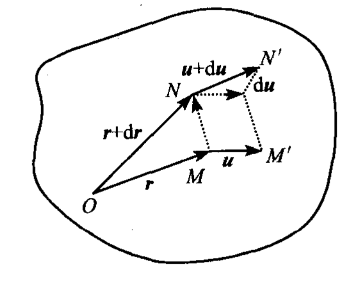


图 3.1.1　相邻两点的位移矢量

应变张量：考察弹性体中相邻二点 M(位置矢量为 $\boldsymbol{r}$)和 N(位置矢量为 $\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r}$)，当弹性体在外力作用下发生形变时，$M$ 和 N 点分别移动到 M'和 N'点，二点分别移动 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{u}+\mathrm{d}\boldsymbol{u}$，如图 3.1.1，相邻二点的位移差为 $\mathrm{d}\boldsymbol{u}$. 显然 $\mathrm{d}\boldsymbol{u}$ 是空间各点的函数，即

$$\mathrm{d}u_i = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\mathrm{d}x_k$$

或者利用 Einstein 求和规则

$$\mathrm{d}u_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\mathrm{d}x_k \tag{3.1.1}$$

$\mathrm{d}\boldsymbol{u}$ 称为**微分位移**. 但是微分位移与弹性体的形变不是一一对应的. 一个例子是：当刚体转动时，微分位移不为零，但形变为零. 研究表明：弹性体内无限邻近两点在形变前后距离变化与弹性体的形变一一对应，因而将它作为弹性体形变的度量是可以的. 显然形变前后的距离变化为

$$\Delta = \overline{M'N'}^2 - \overline{MN}^2$$

$$= |(\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{u}+\mathrm{d}\boldsymbol{u})-(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{u})|^2-|\mathrm{d}\boldsymbol{r}|^2$$

$$= |\mathrm{d}\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{u}|^2-|\mathrm{d}\boldsymbol{r}|^2 = 2\mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{u}+|\mathrm{d}\boldsymbol{u}|^2 \tag{3.1.2}$$

由式(3.1.1)，上式变成

$$\Delta = 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k+\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_l}\mathrm{d}x_k\mathrm{d}x_l \tag{3.1.3}$$

当考虑小形变时，上式第二项可以忽略

$$\Delta = 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}+\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right)\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k \tag{3.1.4}$$

上式写成

$$\Delta = 2e_{ik}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_k \tag{3.1.5}$$

其中

$$e_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k}+\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) \tag{3.1.6}$$

如果令矩阵形式

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r} = [\mathrm{d}x_1,\mathrm{d}x_2,\mathrm{d}x_3];\quad \mathrm{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} = [\mathrm{d}x_1,\mathrm{d}x_2,\mathrm{d}x_3]^{\mathrm{T}} \tag{3.1.7}$$

$$\boldsymbol{e} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial u_1}{\partial x_1} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_1}{\partial x_2}+\dfrac{\partial u_2}{\partial x_1}\right) & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_1}{\partial x_3}+\dfrac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_2}{\partial x_1}+\dfrac{\partial u_1}{\partial x_2}\right) & \dfrac{\partial u_2}{\partial x_2} & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_2}{\partial x_3}+\dfrac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_3}{\partial x_1}+\dfrac{\partial u_1}{\partial x_3}\right) & \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_3}{\partial x_2}+\dfrac{\partial u_2}{\partial x_3}\right) & \dfrac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{bmatrix} \tag{3.1.8}$$

式(3.1.5)可写成

$$\Delta = 2\mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}\cdot\mathrm{d}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} \tag{3.1.9}$$

$\boldsymbol{e}$ **称为应变张量**. 显然，应变张量的元素 e_{11}, e_{22} 和 e_{33} 分别表示 x_1, x_2 和 x_3 坐标轴方向的相对伸缩形变，而 $e_{23}=e_{32}, e_{13}=e_{31}$ 和 $e_{12}=e_{21}$ 分别代表 x_2x_3, x_1x_3 和 x_1x_2 平面内的剪切形变. 由定义(3.1.8)，应变张量是对称的，即 $e_{ik}=e_{ki}$. 考虑弹性体内边长为 $\delta x_1=\delta x_2=\delta x_3=\delta x$ 的正方体元，在形变过程中，体膨胀为

$$\frac{\left(\delta x+\dfrac{\partial u_1}{\partial x_1}\delta x\right)\left(\delta x+\dfrac{\partial u_2}{\partial x_2}\delta x\right)\left(\delta x+\dfrac{\partial u_3}{\partial x_3}\delta x\right)-\delta x\delta x\delta x}{\delta x\delta x\delta x}$$

$$\approx \frac{\partial u_1}{\partial x_1}+\frac{\partial u_2}{\partial x_2}+\frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \nabla\cdot u \tag{3.1.10}$$

因此 $\nabla\cdot u$ 表示体膨胀.

主方向和主应变：一般应变张量的非对角元素不为零. 是否存在一个坐标系，在这个坐标系内，应变张量的非对角元素为零？由于 $\boldsymbol{e}$ 是实对称矩阵，存在矩阵 $\boldsymbol{c}$，使 $\boldsymbol{e}$ 对角化

$$e' = cec^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix} \tag{3.1.11}$$

因此，在以 c 为变换矩阵的新坐标内，应变张量只有对角元素，λ 称为**主应变**，新坐标的三个垂直方向称为**主方向**. 根据线性代数，λ 是矩阵 e 的本征值，即满足方程

$$\begin{vmatrix} \lambda - e_{11} & -e_{12} & -e_{13} \\ -e_{21} & \lambda - e_{22} & -e_{23} \\ -e_{31} & -e_{32} & \lambda - e_{33} \end{vmatrix} = \lambda^3 - I_1\lambda^2 + I_2\lambda - I_3 = 0 \tag{3.1.12}$$

显然 $\lambda_i(i=1,2,3)$ 与坐标变换无关，因此 $I_i(i=1,2,3)$ 为坐标变换的不变量，由三次方程根与系数的关系

$$I_1 = e_{11} + e_{22} + e_{33} = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \tag{3.1.13a}$$

$$I_2 = \begin{vmatrix} e_{11} & e_{12} \\ e_{21} & e_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} e_{22} & e_{23} \\ e_{32} & e_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} e_{33} & e_{31} \\ e_{13} & e_{11} \end{vmatrix}$$

$$= \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_1\lambda_3 \tag{3.1.13b}$$

$$I_3 = \begin{vmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{vmatrix} = \lambda_1\lambda_2\lambda_3 \tag{3.1.13c}$$

注意：空间各点的应变不同，所以每点的主方向也不同. 求出三个主应变 λ_i 后，由特征方程

$$\begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} \tag{3.1.14}$$

其中 $\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = [n_1, n_2, n_3]^{\mathrm{T}}$，可以求出三个特征矢量，它们的方向即为三个相互垂直的主方向.

应力张量：弹性体在力的作用下发生形变，外力撤消后又恢复原状，说明物体内部存在一种内力，也正是由于存在这种与形变有关的内力，物体才具有弹性. 通常将弹性体内任一截面上某点处单位面积所受的内力称为**应力**. 考察弹性体内任一小六面体，如图 3.1.2，以平行于 x_1x_2 平面的小面 c 为例，它的法向为 $\boldsymbol{n}$，但应力 $\boldsymbol{F}_1$ 的方向与 $\boldsymbol{n}$ 并不一致. $\boldsymbol{F}$ 可表示成

$$\boldsymbol{F}_1 = \sigma_{13}\boldsymbol{e}_1 + \sigma_{23}\boldsymbol{e}_2 + \sigma_{33}\boldsymbol{e}_3$$

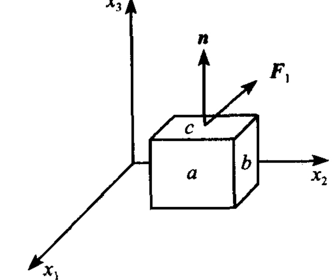


图 3.1.2　弹性体内小六面体的应力

式中：下标的第一个指标表示力的三个方向，第二个指标表示 c 面向上；同样，对小面 b 和 a 上的力可以写成

$$F_2 = \sigma_{12}e_1 + \sigma_{22}e_2 + \sigma_{32}e_3$$
$$F_3 = \sigma_{11}e_1 + \sigma_{21}e_2 + \sigma_{31}e_3 \tag{3.1.15}$$

至于其他的三个面，与上述三个面上的应力大小相等、方向相反. 由此，只需引入上面的 9 个应力分量就可以完全描述小六面体的受力情况. 当小六面体缩小为一个点时，这 9 个应力分量完全描述弹性体内一点的应力分布. 9 个应力分量可以写成矩阵的形式

$$\boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \tag{3.1.16}$$

$\boldsymbol{T}$ 称为**应力张量**. 对空间任一法向为 $\boldsymbol{n}=(n_1, n_2, n_3)$ 的面，应力为

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} \tag{3.1.17}$$

一般，面上的应力 $\boldsymbol{F}$ 与法向 $\boldsymbol{n}$ 不可能一致，称 $\boldsymbol{n}$ 方向的力为正应力，垂直于 $\boldsymbol{n}$ 方向的力为**剪应力**. 显然正应力是 $\boldsymbol{F}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影，即正应力和剪应力为

$$\sigma = \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}; \quad \tau = \sqrt{F^2 - \sigma^2} \tag{3.1.18}$$

应力张量的对称性：考虑点 P 为中心的小六面体，对 P 点的力矩的平衡，由 x_1 方向合力矩为零得

$$\left(\sigma_{32} + \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial x_2}\frac{\mathrm{d}x_2}{2}\right)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_3\frac{\mathrm{d}x_2}{2} + \left(\sigma_{32} - \frac{\partial \sigma_{32}}{\partial x_2}\frac{\mathrm{d}x_2}{2}\right)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_3\frac{\mathrm{d}x_2}{2}$$
$$- \left(\sigma_{23} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_3}\frac{\mathrm{d}x_3}{2}\right)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\frac{\mathrm{d}x_3}{2} - \left(\sigma_{23} - \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_3}\frac{\mathrm{d}x_3}{2}\right)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\frac{\mathrm{d}x_3}{2} = 0$$

即 $\sigma_{32}=\sigma_{23}$，同样可以证明 $\sigma_{21}=\sigma_{12}$ 和 $\sigma_{31}=\sigma_{13}$，即应力张量是对称的.

主坐标和主应力：与应变讨论类似，存在坐标变换矩阵，使

$$\boldsymbol{T}' = \boldsymbol{c}\boldsymbol{T}\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \tag{3.1.19}$$

与上式相应的坐标系称为应力张量的**主坐标系**，显然因为空间各点的应力不同，主坐标系也不同. $\sigma_i(i=1,2,3)$ 称为**主应力**. 应力张量的三个不变量为

$$J_1 = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33} = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3$$
$$J_2 = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \sigma_{33} & \sigma_{31} \\ \sigma_{13} & \sigma_{11} \end{vmatrix}$$
$$= \sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_3 \tag{3.1.20a}$$

$$J_3 = \begin{vmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{vmatrix} = \sigma_1\sigma_2\sigma_3 \tag{3.1.20b}$$

求出三个主应力 σ_i 后，由特征方程

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} \tag{3.1.21}$$

可以求出三个特征矢量，它们的方向即为三个相互垂直的主方向.

3.2　弹性体的本构关系：几种特殊的弹性体

在弹性体中，应力与应变存在一一对应关系. 一般应力是应变的函数，即 $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{T}(\boldsymbol{e})$，或者写成分量的形式 $\sigma_{ik}=\sigma_{ik}(e_{lm})$. 在平衡点（应变为零）附近作 Taylor 展开

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ik}(0) + \left(\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial e_{lm}}\right)_{e_{lm}=0} e_{lm} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial e_{lm}\partial e_{rs}}\right)_{\substack{e_{lm}=0\\ e_{rs}=0}} e_{lm}e_{rs} + \cdots \tag{3.2.1}$$

在应变为零的点 $\sigma_{ik}(0)=0$，故在一阶近似下

$$\sigma_{ik} = c_{iklm}e_{lm} \tag{3.2.2}$$

其中

$$c_{iklm} = \left(\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial e_{lm}}\right)_{e_{lm}=0} \tag{3.2.3}$$

称为**弹性模量**，上式称为**广义 Hooke 定律**. 因应力和应变都是 2 阶张量，因此弹性模量为 4 阶张量，有 $3^4=81$ 个分量，由于应力和应变张量的对称性，即 $T_{ik}=T_{ki}$ 和 $e_{lm}=e_{ml}$，所以弹性模量当交换 i 和 k 或者 l 和 m 时应保持不变，即 $c_{iklm}=c_{kilm}$ 和 $c_{iklm}=c_{ikml}$. 事实上，可以证明弹性模量是完全对称的四阶张量，即满足 $c_{iklm}=c_{kilm}=c_{ikml}=c_{lmik}$. 这样弹性模量一般只有 21 个独立的分量.

由于应力或应变张量只有 6 个独立分量，常把这 6 个独立分量写成 6×1 矩阵：$S=[S_1,S_2,S_3,S_4,S_5,S_6]^{\mathrm{T}}$ 和 $T=[T_1,T_2,T_3,T_4,T_5,T_6]^{\mathrm{T}}$. 与应力或应变张量分量的关系为

$$\begin{aligned} S_1 &= e_{11}; \quad S_2 = e_{22}; \quad S_3 = e_{33} \\ S_4 &= e_{23}; \quad S_5 = e_{13}; \quad S_6 = e_{12} \end{aligned} \tag{3.2.4}$$

$$\begin{aligned} T_1 &= \sigma_{11}; \quad T_2 = \sigma_{22}; \quad T_3 = \sigma_{33} \\ T_4 &= \sigma_{23}; \quad T_5 = \sigma_{13}; \quad T_6 = \sigma_{12} \end{aligned} \tag{3.2.5}$$

于是本构方程(3.2.2)简化成

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix} \tag{3.2.6}$$

或者写成分量形式

$$T_i = \sum_{k=1}^{6} c_{ik} S_k \quad (i = 1,2,\cdots,6) \tag{3.2.7}$$

对称性关系为 $c_{ik}=c_{ki}$. 由于弹性体内部结构的对称性，弹性模量独立个数往往小于 21 个. 常用材料的独立弹性模量个数为：

(1) 各向同性弹性体：独立的弹性模量为 2 个，可以证明弹性模量张量为

$$c_{ijpq} = \lambda \delta_{ij} \delta_{pq} + \mu(\delta_{ip}\delta_{jq} + \delta_{iq}\delta_{jp}) \tag{3.2.8}$$

而应力-应变关系简化成

$$\sigma_{ik} = \lambda e_{ll} \delta_{ik} + 2\mu e_{ik} \tag{3.2.9}$$

写成矩阵的形式

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix} \tag{3.2.10}$$

弹性模量 λ 和 μ 称为 **Lamé 常数**，μ 也称为**剪切模量**. 经常用的二个独立弹性模量为**杨氏模量** E 和**泊松比** σ，与 Lamé 常数的关系为

$$\lambda = \frac{E\sigma}{(1+\sigma)(1-2\sigma)}; \quad \mu = \frac{E}{2(1+\sigma)} \tag{3.2.11}$$

(2) 正交各向异性材料：弹性体中的每一点具有三个垂直的对称面，取坐标轴方向为三个垂直对称面的法向，本构方程为

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix} \tag{3.2.12}$$

显然有 9 个独立弹性模量分量. 工程上也经常表示成应变-应力关系

$$\begin{aligned} e_{11} &= \frac{1}{E_1}(\sigma_{11} - \nu_{12}\sigma_{22} - \nu_{13}\sigma_{33}) \\ e_{22} &= \frac{1}{E_2}(\sigma_{22} - \nu_{21}\sigma_{11} - \nu_{23}\sigma_{33}) \\ e_{33} &= \frac{1}{E_3}(\sigma_{33} - \nu_{31}\sigma_{11} - \nu_{32}\sigma_{22}) \\ e_{12} &= \frac{1}{G_{12}}\sigma_{12}; \quad e_{23} = \frac{1}{G_{23}}\sigma_{23}; \quad e_{31} = \frac{1}{G_{31}}\sigma_{31} \end{aligned} \tag{3.2.13}$$

12个常数中有三个方程

$$\frac{\nu_{12}}{E_1}=\frac{\nu_{21}}{E_2};\quad \frac{\nu_{23}}{E_2}=\frac{\nu_{32}}{E_3};\quad \frac{\nu_{13}}{E_1}=\frac{\nu_{31}}{E_3} \tag{3.2.14}$$

(3) 横向各向同性材料：弹性体中的每一点具有一根对称轴，取坐标轴 z 方向为对称轴方向，本构方程为

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{31} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix} \tag{3.2.15}$$

并且有关系 $c_{66}=(c_{11}-c_{12})/2$. 显然有5个独立弹性模量分量. 工程上也经常表示成应变-应力关系

$$\begin{aligned} e_{11} &= \frac{1}{E}(\sigma_{11}-\nu\sigma_{22})-\frac{\nu'}{E'}\sigma_{33} \\ e_{22} &= \frac{1}{E}(\sigma_{22}-\nu\sigma_{11})-\frac{\nu'}{E'}\sigma_{33} \\ e_{33} &= -\frac{\nu'}{E'}(\sigma_{11}+\sigma_{22})+\frac{1}{E'}\sigma_{33} \\ e_{12} &= \frac{2(1+\nu)}{E}\sigma_{12};\quad e_{23}=\frac{1}{G}\sigma_{23};\quad e_{31}=\frac{1}{G}\sigma_{31} \end{aligned} \tag{3.2.16}$$

3.3 弹性体的平衡、应力张量对称性和能量密度

设 P 点位于弹性体内，取包含 P 点的小体元 D，D 的边界为 ∂D，假定弹性体处于静平衡，那么 ∂D 上的面力合力与 D 内的体力构成一个平衡力系

$$\oint_{\partial D}\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}S+\int_D \boldsymbol{f}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0 \tag{3.3.1}$$

其中 $\boldsymbol{f}$ 为 D 内的力密度，上式面积分利用 Gauss 公式，可得

$$\int_D(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{T}+\boldsymbol{f})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0 \tag{3.3.2}$$

由 D 的任意性，我们得到弹性体力的平衡方程，即

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{T}+\boldsymbol{f}=0 \tag{3.3.3}$$

对原点 O 的力矩平衡条件为

$$\oint_{\partial D}\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}S+\int_D(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0 \tag{3.3.4}$$

把力 $\boldsymbol{f}=f_1\boldsymbol{e}_1+f_2\boldsymbol{e}_2+f_3\boldsymbol{e}_3$ 与 $\boldsymbol{r}=x_1\boldsymbol{e}_1+x_2\boldsymbol{e}_2+x_3\boldsymbol{e}_3$ 的力矩写成分量形式

$$M_k = x_i f_j - x_j f_i \quad (i,j,k=1,2,3,\text{且 } i\neq j\neq k) \tag{3.3.5}$$

故方程(3.3.4)中第一个面积分的分量为

$$\begin{aligned} M_k &= \oint_{\partial D}(\sigma_{jp}x_i - x_j\sigma_{ip})n_p \mathrm{d}S = \int_V \frac{\partial}{\partial x_p}(\sigma_{jp}x_i - x_j\sigma_{ip})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \int_V\left(\frac{\partial\sigma_{jp}}{\partial x_p}x_i - \frac{\partial\sigma_{ip}}{\partial x_p}x_j + \sigma_{jp}\frac{\partial x_i}{\partial x_p} - \sigma_{ip}\frac{\partial x_j}{\partial x_p}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \end{aligned}$$

得到式(3.3.4)的一个分量方程为

$$\int_V\left[\left(\frac{\partial\sigma_{jp}}{\partial x_p}+f_j\right)x_i - \left(\frac{\partial\sigma_{ip}}{\partial x_p}+f_i\right)x_j + (\sigma_{jp}\delta_{ip} - \sigma_{ip}\delta_{jp})\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0$$

由力的平衡方程(3.3.3)，积分号中前两项为零，于是

$$\int_V(\sigma_{jp}\delta_{ip} - \sigma_{ip}\delta_{jp})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0 \tag{3.3.6}$$

即得

$$\sigma_{ji} = \sigma_{ij} \tag{3.3.7}$$

因此力矩平衡条件要求应力张量是一个对称张量，没有给出新的条件. 故弹性体的平衡条件即为式(3.3.3). 对各向同性的弹性体，应变和应力的关系由式(3.2.9)给出，写成张量形式即为

$$\boldsymbol{T} = \lambda(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I} + \mu(\boldsymbol{u}\nabla + \nabla\boldsymbol{u}) \tag{3.3.8}$$

取散度得到

$$\begin{aligned} \nabla\cdot\boldsymbol{T} &= \nabla\cdot[\lambda(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I} + \mu(\boldsymbol{u}\nabla + \nabla\boldsymbol{u})] \\ &= (\lambda+\mu)\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) + \mu\nabla^2\boldsymbol{u} \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

因此力的平衡方程为

$$\nabla^2\boldsymbol{u} + \frac{1}{1-2\sigma}\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) + \frac{1}{\mu}\boldsymbol{f} = 0 \tag{3.3.10}$$

其中利用了关系

$$\frac{\lambda+\mu}{\mu} = \frac{1}{1-2\sigma} \tag{3.3.11}$$

当外力为零，即 $\boldsymbol{f}=0$ 时，由方程(3.3.10)有

$$\nabla^2\boldsymbol{u} + \frac{1}{1-2\sigma}\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.3.12}$$

上式求散度

$$\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.3.13a}$$

因此体膨胀 $\nabla\cdot\boldsymbol{u}$ 为调和函数，方程(3.3.12)两边用 Laplace 算子作用，再利用上式得到

$$\nabla^2\nabla^2\boldsymbol{u} = 0 \tag{3.3.13b}$$

即在无外力作用下，弹性体的位移矢量满足双调和方程，双调和算子的具体形式为

$$\nabla^2\nabla^2=\frac{\partial^4}{\partial x^4}+\frac{\partial^4}{\partial y^4}+\frac{\partial^4}{\partial z^4}+2\frac{\partial^4}{\partial x^2\partial y^2}+2\frac{\partial^4}{\partial x^2\partial z^2}+2\frac{\partial^4}{\partial z^2\partial y^2}$$

边界条件:弹性体一般是有限的,在与其他物体交界面存在边界条件,边界条件分三类,即

1. 位移边界条件:在部分边界上,弹性体的位移给定 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}_0$;
2. 应力边界条件:在部分边界上,弹性体的边界应力给定

$$\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{t}_0 \tag{3.3.14}$$

3. 混合边界条件:在边界上,除给定位移和应力外的边界条件,如在边界切向给定位移,而法向给定外力等.最常见的如给定关系

$$\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}+k\boldsymbol{u}=\boldsymbol{t}_0 \tag{3.3.15}$$

其中 k 为任意函数.

弹性体中的能量密度:在弹性体内取小体元 D,D 的边界为 ∂D,设由于应力场 $\boldsymbol{T}$ 作用而存在应变场 e_{ik},如果新产生一微小形变 δe_{ik},在此过程中,D 的表面应力做的功为

$$W=\oint_{\partial D}(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{u}\mathrm{d}S=\oint_{\partial D}\sigma_{ij}n_j\mathrm{d}u_i\mathrm{d}S$$
$$=\int_D\left(\frac{\partial}{\partial x_j}\sigma_{ij}\mathrm{d}u_i\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_D\left[\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}\mathrm{d}u_i+\sigma_{ij}\mathrm{d}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

假定弹性体在这个微小形变过程中处于平衡状态,于是在没有外力情况下 $\nabla\cdot\boldsymbol{T}=0$,即上述积分的第一项为零

$$W=\int_D\sigma_{ij}\mathrm{d}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{2}\int_D\sigma_{ij}\mathrm{d}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$=\int_D\sigma_{ij}\mathrm{d}e_{ij}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{3.3.16}$$

因此在弹性体作无限小形变过程中,单位体积应力做的功为

$$\mathrm{d}W=\sigma_{ik}\mathrm{d}e_{ik} \tag{3.3.17a}$$

即为

$$\mathrm{d}W=\sigma_{11}\delta e_{11}+\sigma_{22}\delta e_{22}+\sigma_{33}\delta e_{33}$$
$$+2\sigma_{23}\delta e_{23}+2\sigma_{13}\delta e_{13}+2\sigma_{12}\delta e_{12} \tag{3.3.17b}$$

当弹性体从零应变状态到应变状态 e_{ik},应力做的功为

$$W=\int_{\Gamma_0}^{\Gamma}\sigma_{ik}\mathrm{d}e_{ik} \tag{3.3.18}$$

其中 Γ 和 Γ_0 分别表示零应变状态和应变状态 e_{ik}.对线性弹性体,上述积分与从零应变状态 Γ_0 变化到应变状态 Γ 的路径无关,因此可以选最简单的成比例路径,即

$$[e_{ik}]_{\Gamma_0}=t[e_{ik}]_{\Gamma} \tag{3.3.19}$$

于是

$$W = \int_{\Gamma_0}^{\Gamma} \sigma_{ik} \mathrm{d}e_{ik} = \int_0^1 \sigma_{ik} e_{ik} t \, \mathrm{d}t = \frac{1}{2} \sigma_{ik} e_{ik} \tag{3.3.20}$$

这是线性弹性体应变能量密度的一般关系. 对各向同性的固体

$$W = \frac{1}{2} [\lambda (e_{ll})^2 + 2\mu e_{ik} e_{ik}] \tag{3.3.21}$$

例 3.3.1　证明在条件

$$\mu > 0 \text{ 和} (3\lambda + 2\mu) > 0 \tag{3.3.22}$$

下,应力场是唯一的.

解:　应力场满足下列边值问题,即平衡方程、边界条件和本构方程

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{T} + \boldsymbol{f} = 0; \quad \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{t}_0 \\ \boldsymbol{T} = \lambda (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} + \mu (\boldsymbol{u} \boldsymbol{\nabla} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}) \end{gathered} \tag{3.3.23}$$

要证明解的唯一性,即证明下列零边值问题只有零解

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{T} = 0; \quad \boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = 0 \\ \boldsymbol{T} = \lambda (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} + \mu (\boldsymbol{u} \boldsymbol{\nabla} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}) \end{gathered} \tag{3.3.24}$$

对应变能量密度在弹性体上作体积分

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} e_{ij} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} u_{i,j} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = \frac{1}{2} \int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) - u_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \right] \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \\ &= \frac{1}{2} \left[\oint_S \sigma_{ij} u_i n_j \mathrm{d}S - \int_V \sigma_{ij,j} u_i \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\oint_S (\boldsymbol{T} \cdot \boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}) \cdot \boldsymbol{u} \mathrm{d}S - \int_V (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{T}) \cdot \boldsymbol{u} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \right] \equiv 0 \end{aligned}$$

另一方面,利用本构方程

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{2} [\lambda (e_{kk})^2 + 2\mu e_{ij} e_{ij}] = \frac{1}{2} [\lambda (e_{11} + e_{22} + e_{33})^2 \\ &\quad + 2\mu (e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) + 2\mu (e_{12}^2 + e_{13}^2 + e_{23}^2)] \\ &= \frac{1}{2} [(\lambda + 2\mu)(e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) + 2\mu (e_{12}^2 + e_{13}^2 + e_{23}^2) \\ &\quad + 2\lambda (e_{11} e_{22} + e_{11} e_{33} + e_{22} e_{33})] \end{aligned} \tag{3.3.25}$$

在条件式(3.3.22)下,上式是正定的二次式(见习题 3.5). 因此如果 $e_{ik} = 0$,则恒有 $\sigma_{ik} = 0$,故应力场是唯一的.

3.4　弹性体中的波、弹性算子的完备性和声子晶体

弹性体中由于存在弹性恢复力,当弹性体的某一部分受到小的扰动,扰动以波的形式传播. 在无界空间,弹性波只有三个传播模式,即一个纵波和二个横波模式. 但在有限空间,弹性波还存在其他模式或类型. 典型的有:半空间上的表面波模式、板中的 Lamb 波模式波以及固体界面传播的 Stonely 波模式(界面波).

设 P 点位于弹性体内，取包含 P 点的小体元 D，D 的边界为 ∂D，小体元的运动由牛顿第二定律决定，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_D \rho\dot{\boldsymbol{u}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \oint_{\partial D}\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}S + \int_D \boldsymbol{f}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{3.4.1}$$

考虑弹性体的小应变，全导数与偏导数一致，立即可得弹性体的动力学方程（注意：小应变条件）

$$\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial t^2} = \nabla\cdot\boldsymbol{T} + \boldsymbol{f} \tag{3.4.2}$$

对各向同性的弹性体，利用本构方程(3.3.8)或者(3.3.9)，上式可写成形式

$$\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial t^2} = (\lambda+\mu)\nabla\nabla\cdot\boldsymbol{u} + \mu\nabla^2\boldsymbol{u} + \boldsymbol{f} \tag{3.4.3}$$

或者分量形式

$$\rho\ddot{u}_i = (\lambda+\mu)u_{j,ij} + \mu u_{i,jj} + f_i \quad (i=1,2,3) \tag{3.4.4}$$

利用矢量恒等式

$$\nabla^2\boldsymbol{u} = \nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) - \nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{u}) \tag{3.4.5}$$

方程(3.4.3)变成

$$\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial t^2} = (\lambda+2\mu)\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) - \mu\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{f} \tag{3.4.6}$$

为了讨论方便，定义弹性算子

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u}) = \nabla\cdot\boldsymbol{T} = (\lambda+2\mu)\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) - \mu\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{u}) \tag{3.4.7}$$

或者分量形式

$$[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})]_i = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j} = (\lambda+\mu)u_{j,ij} + \mu u_{i,jj} \tag{3.4.8}$$

另外，对有限的弹性体，一般边界为应力边界，即

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{t}_0\\&\boldsymbol{T} = \lambda(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I} + \mu(\boldsymbol{u}\nabla + \nabla\boldsymbol{u})\end{aligned} \tag{3.4.9}$$

写成边界弹性算子的形式即为

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{u}) \equiv [\lambda(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I} + \mu(\boldsymbol{u}\nabla + \nabla\boldsymbol{u})]\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{t}_0 \tag{3.4.10}$$

或者分量形式

$$[\boldsymbol{B}(\boldsymbol{u})]_i = T_{ij}n_j = \lambda u_{k,k}n_i + \mu(u_{i,j} + u_{j,i})n_j = t_{0i} \tag{3.4.11}$$

进一步，定义弹性算子的本征值问题，即求下列齐次问题的非零解以及存在非零解的本征频率 ω

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u}) + \rho\omega^2\boldsymbol{u} = 0,\quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{u}) = 0 \tag{3.4.12}$$

那么 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 具有性质：

1. 所有的本征角频率 ω 为实数.

在证明这一结论前，先介绍广义 Green 公式：对位移场 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$

$$\int_V [\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{L}(\boldsymbol{v})\cdot\boldsymbol{u}]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_V\left[\frac{\partial\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})}{\partial x_j}v_i-\frac{\partial\sigma_{ij}(\boldsymbol{v})}{\partial x_j}u_i\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int_V\left[\frac{\partial}{\partial x_j}[\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})v_i-\sigma_{ij}(\boldsymbol{v})u_i]-\left[\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})\frac{\partial v_i}{\partial x_j}-\sigma_{ij}(\boldsymbol{v})\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right]\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\oint_S[\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})v_i-\sigma_{ij}(\boldsymbol{v})u_i]n_j\mathrm{d}S-\int_V\left[\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})\frac{\partial v_i}{\partial x_j}-\sigma_{ij}(\boldsymbol{v})\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

因应力场是位移场的函数，所以为了避免混淆，上式中写明了应力张量依赖于位移场. 利用本构关系 $\sigma_{ik}(\boldsymbol{u})=\lambda u_{l,l}\delta_{ik}+\mu(u_{i,k}+u_{k,i})$，容易证明上式体积分内函数为零. 于是广义 Green 公式的形式为

$$\int_V[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{L}(\boldsymbol{v})\cdot\boldsymbol{u}]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\oint_S[\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})v_i-\sigma_{ij}(\boldsymbol{v})u_i]n_j\mathrm{d}S \tag{3.4.13}$$

取方程(3.4.12)的复共轭

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u}^*)+\rho\omega^{*2}\boldsymbol{u}^*=0;\quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{u}^*)=0 \tag{3.4.14}$$

广义 Green 公式(3.4.13)中取 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{u}^*$，于是

$$(\omega^{*2}-\omega^2)\int_V\rho\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}^*\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\oint_S[\boldsymbol{B}(\boldsymbol{u})\cdot\boldsymbol{u}^*-\boldsymbol{B}(\boldsymbol{u}^*)\cdot\boldsymbol{u}]\mathrm{d}S=0 \tag{3.4.15}$$

即 $\omega^*=\omega$，因此本征角频率 ω 为实数.

2. 所有的本征角频率 ω 非负.

方程(3.4.12)第一式点乘 $\boldsymbol{u}^*$ 并积分

$$\omega^2\int_V\rho\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u}^*\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=-\int_V u_i^*\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=-\int_V\left[\frac{\partial(\sigma_{ij}u_i^*)}{\partial x_j}-\sigma_{ij}\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\oint_S\sigma_{ij}n_ju_i^*\mathrm{d}S+\int_V\sigma_{ij}\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_V\sigma_{ij}\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int_v[\lambda u_{k,k}\delta_{ij}u_{i,j}^*+\mu(u_{i,j}+u_{j,i})u_{i,j}^*]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int_v[\lambda\,|\,u_{k,k}\,|^2+\mu u_{i,j}u_{i,j}^*+\mu u_{j,i}u_{i,j}^*]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

上式积分中前二项显然大于零，而最后一项是实对称的，积分必大于零，所以 $\omega^2\geqslant 0$.

3. 对应于不同本征角频率的非零解(称为本征函数)正交.

假定 ω_m 和 ω_n 分别是对应于 $\boldsymbol{u}_m$ 和 $\boldsymbol{u}_n$ 的本征角频率，方程(3.4.13)中取 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}_m$ 和 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{u}_n^*$，于是

$$(\omega_n^2-\omega_m^2)\int_V\rho\boldsymbol{u}_m\cdot\boldsymbol{u}_n^*\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0 \tag{3.4.16}$$

而 $\omega_m\neq\omega_n$，只有体积分为零.

4. 函数系 $\boldsymbol{u}_m(m=1,2,3,\cdots)$ 构成完备系. 本结论的证明比较复杂，故略. 因此下列边值问题

$$\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial t^2}=\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})+\boldsymbol{f};\quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{u})=\boldsymbol{b} \tag{3.4.17}$$

的解可用函数系 $\boldsymbol{u}_m(m=1,2,3,\cdots)$作广义 Fourier 展开

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)=\sum_{m=1}^{\infty}\Omega_m(t)\boldsymbol{u}_m(\boldsymbol{r}) \tag{3.4.18}$$

注意:指标 m 是一个指标集且至多可能有 3 个. 上式中广义 Fourier 系数为

$$\rho\Omega_m(t)=\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{3.4.19}$$

得到上式,已假定归一化条件

$$\int_V\rho\boldsymbol{u}_m(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=1 \tag{3.4.20}$$

式(3.4.19)对时间求导两次,并利用方程(3.4.17)

$$\begin{aligned}\rho\frac{\mathrm{d}^2\Omega_m(t)}{\mathrm{d}t^2}&=\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\frac{\partial^2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t^2}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&=\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})+\boldsymbol{f}]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&=\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}+\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{f}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{3.4.21}$$

上式第一个积分利用广义 Green 公式(3.4.13)

$$\begin{aligned}\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}&=\int_V\rho\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{L}(\boldsymbol{u}_m^*)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&\quad+\oint_S[\sigma_{ij}(\boldsymbol{u})u_{mi}^*-\sigma_{ij}(\boldsymbol{u}_m^*)u_i]n_j\mathrm{d}S\\&=-\rho\omega_m^2\Omega_m+\oint_S(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{u}_m^*)\mathrm{d}S\end{aligned} \tag{3.4.22}$$

上式已利用了边界条件 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{u})=\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{u}_m^*)=0$. 于是

$$\frac{\mathrm{d}^2\Omega_m(t)}{\mathrm{d}t^2}+\omega_m^2\Omega_m=\frac{1}{\rho}\oint_S(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{u}_m^*)\mathrm{d}S+\int_V\rho\boldsymbol{u}_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{f}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\equiv f_h(t)$$

假定位移场满足零初始条件,那么

$$\Omega_m(t)=\int_0^t f_h(\xi)\sin[\omega_m(t-\xi)]\mathrm{d}\xi \tag{3.4.23}$$

形式上,我们已求得了边值问题(3.4.17)的解,但事实上,求函数系 $\boldsymbol{u}_m$ 是非常困难的. 目前只有几种情况可求得解析的解,如弹性板和球.

无界空间:一个矢量函数可表示成一个标量函数的梯度与一个零散度矢量函数的旋度,即

$$\boldsymbol{u}=\nabla\Phi+\nabla\times\boldsymbol{A},\quad \nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{3.4.24}$$

代入方程(3.4.6)

$$\nabla\left[(\lambda+2\mu)\nabla^2\Phi-\rho\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}\right]+\nabla\times\left[\mu\nabla^2\boldsymbol{A}-\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}\right]=-\boldsymbol{f} \tag{3.4.25}$$

另一方面,把 $\boldsymbol{f}$ 也表示成一个标量函数的梯度与一个零散度矢量函数的旋度

$$\boldsymbol{f} = \nabla f_{\mathrm{b}} + \nabla \times \boldsymbol{f}_{\mathrm{r}} \tag{3.4.26}$$

于是方程(3.4.25)恒成立的条件为

$$\rho \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - (\lambda + 2\mu)\nabla^2 \Phi = f_{\mathrm{b}}; \quad \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} - \mu \nabla^2 \boldsymbol{A} = \boldsymbol{f}_{\mathrm{r}} \tag{3.4.27}$$

上式是两个波动方程：标量波 Φ 称为**纵波**，而矢量波 $\boldsymbol{A}$ 称为**横波**. 我们来看一下纵波和横波的意义. 假定无外力作用，即 $\boldsymbol{f}=0$. 如果 $\boldsymbol{A}=0$，Φ 取平面波形式

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = \Phi_0 \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{3.4.28}$$

代入方程(3.4.24)

$$\boldsymbol{u} = \nabla\Phi = \mathrm{i}\boldsymbol{k}\Phi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.4.29}$$

其中 $k=\omega/c_{\mathrm{l}}$ 为波数，$c_{\mathrm{l}}=\sqrt{(\lambda+2\mu)/\rho}$ 为纵波速度. 上式表明：位移方向与波传播方向 $\boldsymbol{k}$ 一致，故称为**纵波**(或者 L 波). 另一方面，如果 $\Phi=0$，$\boldsymbol{A}$ 取平面波形式

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{A}_0 \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{3.4.30}$$

代入方程(3.4.24)

$$\boldsymbol{u} = \nabla\times\boldsymbol{A} = \mathrm{i}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \tag{3.4.31}$$

其中 $k=\omega/c_{\mathrm{t}}$ 为波数，$c_{\mathrm{t}}=\sqrt{\mu/\rho}$ 为横波速度. 上式表明：位移方向与波传播方向 $\boldsymbol{k}$ 垂直，故称为**横波**(或者 T 波).

故在无界空间中可以传播两类弹性波：纵波和横波. 而横波有 2 个独立的偏振方向：平行于传播面的偏振(即与 $\boldsymbol{k}$ 在同一个平面内)，称为 SV 波；垂直于传播面的偏振，称为 SH 波. 为了更清楚说明纵波和横波的物理意义，对方程(3.4.6)两边求散度得到

$$\rho \frac{\partial^2 (\nabla\cdot\boldsymbol{u})}{\partial t^2} = (\lambda + 2\mu)\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{u}) + \nabla\cdot\boldsymbol{f} \tag{3.4.32}$$

而 $\nabla\cdot\boldsymbol{u}$ 是体膨胀，故纵波实质上是体膨胀的传播，因此也称为**体膨胀或压缩波**(即 P 波)；对方程(3.4.6)两边求旋度得到

$$\rho \frac{\partial^2 (\nabla\times\boldsymbol{u})}{\partial t^2} = \mu\nabla^2(\nabla\times\boldsymbol{u}) + \nabla\times\boldsymbol{f} \tag{3.4.33}$$

故横波实质上是扭曲的的传播，因此也称为**扭曲**或**切变波**(即 S 波).

以上我们讨论的是各向同性介质，对各向异性介质，把本构方程(3.2.2)代入弹性波动方程(3.4.2)并且假定体力为零

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \frac{1}{2} c_{iklm} \left(\frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_m} + \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_k \partial x_l} \right) = c_{iklm} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_k \partial x_m} \tag{3.4.34}$$

最后一个等号利用了弹性模量的对称性. 注意：此时不能引入标量势和矢量势. 设平面波解为

$$u_i = U_i \exp[\mathrm{i}(k_l x_l - \omega t)] \quad (i = 1,2,3) \tag{3.4.35}$$

代入式(3.4.34)得到

$$(\rho\omega^2\delta_{im} - c_{islm}k_sk_l)U_m = 0 \quad (i = 1,2,3) \tag{3.4.36}$$

显然上式存在非零解的条件为系数行列式等于零

$$\det(\rho c^2\delta_{im} - \Gamma_{im}) = 0 \tag{3.4.37}$$

称为 **Christoffel 方程**，其中 Christoffel 张量定义为

$$\Gamma_{im} = c_{islm}n_sn_l \quad (i,m = 1,2,3) \tag{3.4.38}$$

单位矢量定义为 $k_s=kn_s$，$k_l=kn_l$；相速度为 $c=\omega/k$. 显然相速度 c 与波传播方向有关，而且也没有纯粹的纵波和横波，只有在特殊的方向，才能传播完全解耦的纵波和横波.

半无限空间的表面波：在半无限空间的固体表面传播的弹性波，其特点是位移随深度指数衰减，只能沿固体的表面传播. 方程(3.4.6)仍然成立，为了简单，假定：①体力为零(只考虑波的传播问题，而不考虑波的激发)；②二维问题，波沿 x 方向传播，z 方向指数衰减，矢量势只有一个分量 $\boldsymbol{A}=A(x,z,t)\boldsymbol{e}_y$. 于是对各向同性的固体

$$\rho\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - (\lambda+2\mu)\nabla^2\Phi = 0;\quad \rho\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \mu\nabla^2 A = 0 \tag{3.4.39}$$

在固体-空气界面上满足应力自由的边界条件：$\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}|_{z=0}=0$，写成分量形式且用势函数来表示，则

$$\left[\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - 2c_t^2\left(\frac{\partial^2 A}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right)\right]_{z=0} = 0;\quad \left(\frac{\partial^2 A}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + 2\frac{\partial^2\Phi}{\partial x\partial z}\right)_{z=0} = 0$$

薄板中的 Lamb 波：实际上半无限厚的介质是不存在的，以板为例，只要弹性波波长远小于板厚度，就可认为介质是半无限的. 但当弹性波波长与板厚度在同一个数量级时，必须同时考虑上下表面的边界条件. 这时弹性波的传播更为复杂. 基本方程仍然是方程(3.4.6)，上下边界假定是应力自由的，即 $\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}|_{z=0,d}=0$(这里假定板的厚度为 d). 在薄板中传播的弹性波称为 Lamb 波.

界面波：设半无限大固体 1 和半无限大固体 2 完全接触组成一个弹性空间，分界面为 $z=0$. 则在界面存在另一种波型，称为 Stonely 波，或界面波. 其特点是位移分布集中在界面附近很小的距离内，波只能沿固体的界面传播. 在分界面 $z=0$ 必须满足的边界条件为：①法向位移连续；②界面的法向应力连续，即

$$(\boldsymbol{u}_1 - \boldsymbol{u}_2)\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = 0;\quad (\boldsymbol{T}_1 - \boldsymbol{T}_2)\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} = 0 \tag{3.4.40}$$

当一个半空间是液体时，在界面传播的波称为 Scholte 波.

周期结构中的波：由两种以上材料周期排列而组成的弹性结构. 弹性波在这种结构中传播呈现出有趣的特性. 如果 x，y 和 z 方向的周期分别为 a_1，a_2 和 a_3，那么 Lamé 常数和密度也都是空间坐标的周期函数，即

$$\lambda(\boldsymbol{r}) = \lambda(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_{mnl}),\quad \mu(\boldsymbol{r}) = \mu(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_{mnl}),\quad \rho(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_{mnl})$$

其中 $\boldsymbol{R}_{mnl}=ma_1\boldsymbol{e}_1+na_2\boldsymbol{e}_2+la_3\boldsymbol{e}_3(m,n,l=0,\pm1,\pm2,\cdots)$. 定义局部纵波速度和横

波速度如下

$$c_l(\boldsymbol{r})=\sqrt{\frac{\lambda(\boldsymbol{r})+2\mu(\boldsymbol{r})}{\rho(\boldsymbol{r})}},\quad c_t(\boldsymbol{r})=\sqrt{\frac{\mu(\boldsymbol{r})}{\rho(\boldsymbol{r})}} \tag{3.4.41}$$

应力-应变关系式(3.2.9)变成

$$\sigma_{ij}=2\rho c_t^2 e_{ij}+\rho(c_l^2-2c_t^2)e_{kk}\delta_{ij} \tag{3.4.42}$$

相应的波动方程为

$$\rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}=\boldsymbol{\nabla}\cdot(\rho c_t^2\boldsymbol{\nabla}u_i)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\rho c_t^2\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial x_i}\right]+\frac{\partial}{\partial x_i}[(\rho c_l^2-2\rho c_t^2)\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}] \tag{3.4.43}$$

由于纵波和横波速度以及密度是空间的函数，上式再也不能分解成纵波和横波了.但是由于空间上的周期性，$\rho(\boldsymbol{r})$，$c_l(\boldsymbol{r})$和 $c_t(\boldsymbol{r})$可以展开为 Fourier 级数

$$\chi(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{G}}\chi(\boldsymbol{G})\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{3.4.44}$$

其中 χ 表示 $\rho(\boldsymbol{r})$，$C_{11}(\boldsymbol{r})=\rho c_l^2(\boldsymbol{r})$和 $C_{44}(\boldsymbol{r})=\rho c_t^2(\boldsymbol{r})$，$\boldsymbol{G}$ 为倒格矢

$$\boldsymbol{G}=2\pi\left(\frac{m}{a_1}\boldsymbol{e}_1+\frac{n}{a_2}\boldsymbol{e}_2+\frac{l}{a_3}\boldsymbol{e}_3\right) \tag{3.4.45}$$

而周期性位移矢量 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)$满足 Bloch 定理

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)=\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]\sum_{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G})\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{3.4.46}$$

其中 ω 是角频率，$\boldsymbol{k}$ 是波矢. 上式代入方程(3.4.43)可以得到

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{G}'}\{&C_{44}(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G}')(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}')\cdot(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\\&+C_{44}(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G}')\cdot(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}')\\&+[C_{11}(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')-2C_{44}(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')]\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G}')\cdot(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\\&-\omega^2\rho(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G}')\}=0\end{aligned} \tag{3.4.47}$$

显然上式是关于 $\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G})$的齐次线性方程. 如果 $\boldsymbol{G}$ 取倒格子空间所有的矢量值，那么上式是关于 $\boldsymbol{u}_k(\boldsymbol{G})$的无限线性联立方程组，存在解的条件为系数行列式等于零. 给定 $\boldsymbol{k}$ 的值，就可求出相应的 $\omega(\boldsymbol{k})$，从而求出 $\boldsymbol{k}\sim\omega$ 关系，即弹性波的色散关系. 在无限空间中，$\boldsymbol{k}\sim\omega$ 一般是线性关系，但对周期结构，在某一频率范围里上式无解，即存在所谓禁带. 与晶体中电子的能带结构类似，故称弹性周期结构为声子晶体.

习　题　3

3.1　用坐标变换矩阵直接证明主应变之和 $e_{11}+e_{22}+e_{33}$是不变量.（提示：利用坐标变换的正交条件 $\sum_{k=1}^{3}c_{ik}c_{jk}=\delta_{ij}$）

3.2　一点的应力分量为 $T_{11}=T_{22}=T_{33}=0, T_{12}=T_{23}=T_{13}=\sigma$. 求:(1) 过这点且法向为

$$\boldsymbol{n}=\frac{1}{\sqrt{3}}(\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3)$$

的平面上的正应力和剪切力;(2) 主应力、主应力方向.

3.3　已知一点的主应力为 σ_1, σ_2 和 σ_3,求与三个应力主轴成等角的倾斜面上的正应力 σ_0 和剪切力 τ_0,并证明 σ_0 和 τ_0 是坐标变换的不变量.(提示:$\alpha=\beta=\gamma$, $\boldsymbol{n}=\frac{1}{\sqrt{3}}(\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3)$)

3.4　证明:各向同性弹性体的 Hooke 定律

$$\sigma_{ij}=\lambda e_{kk}\delta_{ij}+2\mu e_{ij}$$

在坐标变换下形式不变.(提示:令 $\sigma'_{ij}=\sum_{k,l=1}^{3} c_{ik}c_{jl}\sigma_{kl}$,把上式代入 Hooke 定律)

3.5　证明二次型

$$w=\frac{1}{2}[(\lambda+2\mu)(e_{11}^2+e_{22}^2+e_{33}^2)+2\mu(e_{12}^2+e_{13}^2+e_{23}^2)$$
$$+2\lambda(e_{11}e_{22}+e_{11}e_{33}+e_{22}e_{33})]$$

在条件

$$\mu>0 \text{ 和 } 3\lambda+2\mu>0$$

下正定.(提示:用二次型正定的充要条件,即代数子式大于零)

3.6　设方程(3.4.39)具有表面波形式的解

$$\Phi=\Phi_0\exp(-\alpha z)\exp[\mathrm{i}(\omega t-kx)]$$
$$A=A_0\exp(-\beta z)\exp[\mathrm{i}(\omega t-kx)]$$

(1) 证明

$$\alpha^2=k^2-k_l^2;\quad \beta^2=k^2-k_t^2$$

其中 $k_l=\omega/c_l; k_t=\omega/c_t$;

(2) 令 $c=\omega/k$、$g=(c/c_t)^2$ 和 $q=(c_t/c_l)^2$,证明 c 满足方程

$$g^3-8g^2+8(3-2q)g+16(q-1)=0$$

上式即为表面波速度满足的方程;

(3) 设泊松比 $\sigma=1/4$,证明 $c\approx 0.919c_t$.(提示:(1) 把表面波解代入方程(3.4.39);(2) 把表面波解代入边界条件)

第4章　流体的运动

流体与固体最大的不同就是流体完全没有固定的形状，具有一定的流动性. 由于流体流动性，它的输运性质也区别于固体. 例如，宏观上表现为黏滞现象的动量输运过程，当层流的各层速度不同时，层与层之间将相互施加作用力，阻碍各层流体之间的相对运动；宏观上表现为扩散现象的质量输运过程，当流体的密度分布不均匀时，流体的质量会从高密度区移动到低密度区. 因此流体运动的描述方法和动力学特性与固体有较大的区别. 流体力学的内容非常丰富，运动形式多样，如流体涡流、层流和湍流等. 本章将介绍流体运动的描述方法和基本的动力学方程，并对流体的运动作一些基本的讨论.

4.1　流体中的应变、应力张量和本构方程

首先介绍流体运动的描述方法. 通常采用二种方法来描述流体的运动：Lagrange 坐标和 Euler 坐标.

Lagrange 描述：以流体质点的初始坐标(a,b,c)来识别一个特定质点，在时刻t，该质点的位置矢量是$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}(a,b,c,t)$，而该质点的速度矢量为

$$\boldsymbol{v}(a,b,c,t)=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\boldsymbol{r}(a,b,c,t+\Delta t)-\boldsymbol{r}(a,b,c,t)}{\Delta t}=\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial t} \tag{4.1.1}$$

显然，该流体质点不管什么时候运动到哪里，它的 Lagrange 坐标(a,b,c)是不变的. Lagrange 描述比较适合于流体质点作大幅度振动的情况，但更常用的是 Euler 描述.

Euler 描述：与 Lagrange 描述不同，Euler 描述是在空间建立坐标系统(x_1,x_2,x_3)，所有的物理量是(x_1,x_2,x_3)和时间的函数. 当某时刻t，流体流动到点(x_1,x_2,x_3)时，即具有该点在时刻t的一切特征. 若以f表示流体的一个物理量，其 Euler 描述的数学表达式为

$$f=f(x_1,x_2,x_3,t)\equiv f(\boldsymbol{r},t) \tag{4.1.2}$$

如流体速度的 Euler 描述是

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}(x_1,x_2,x_3,t) \tag{4.1.3}$$

它表示在空间点(x_1,x_2,x_3)上，在时刻t的流体速度，即在时刻t，不管是哪个质点，运动到点(x_1,x_2,x_3)就具有速度$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}(x_1,x_2,x_3,t)$. 因此$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}(x_1,x_2,x_3,t)$实际上是一个速度场. 考察时刻$t$位于$\boldsymbol{r}=(x_1,x_2,x_3)$的流体质点，在$t+\Delta t$时刻运

动到 $\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r}$，如图 4.1.1，那么这个质点的加速度为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}&=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}+\Delta\boldsymbol{r},t+\Delta t)-\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)}{\Delta t}\\&=\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}+\lim_{\Delta t\to 0}\frac{(\Delta\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)}{\Delta t}\\&=\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v}\end{aligned}\tag{4.1.4}$$

图 4.1.1　流体质点的运动

可见加速度不仅仅是速度场的偏导数. 在流体运动的 Euler 描述中，物理量的全导数与偏导数都有关系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla})\tag{4.1.5}$$

第二项称为对流项. 我们主要介绍 Euler 描述.

应变率张量：下面来分析流体场中一点邻域的相对运动. 设时刻 t，在流体场中取一点 $P_0(\boldsymbol{r})$ 的邻域中的任一点 $P(\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r})$，那么该点的速度为

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r})=\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})+\delta\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})+\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial x_1}\delta x_1+\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial x_2}\delta x_2+\frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial x_3}\delta x_3$$

显然 $\delta\boldsymbol{v}$ 是 P 点相对于 P_0 点的相对运动速度，上式可以写成矩阵的形式

$$\begin{bmatrix}\delta v_1\\\delta v_2\\\delta v_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial v_1}{\partial x_1}&\dfrac{\partial v_1}{\partial x_2}&\dfrac{\partial v_1}{\partial x_3}\\\dfrac{\partial v_2}{\partial x_1}&\dfrac{\partial v_2}{\partial x_2}&\dfrac{\partial v_2}{\partial x_3}\\\dfrac{\partial v_3}{\partial x_1}&\dfrac{\partial v_3}{\partial x_2}&\dfrac{\partial v_3}{\partial x_3}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\delta x_1\\\delta x_2\\\delta x_3\end{bmatrix}\tag{4.1.6}$$

而矩阵可分解成对称和反对称矩阵的和，即

$$\begin{bmatrix}\dfrac{\partial v_1}{\partial x_1}&\dfrac{\partial v_1}{\partial x_2}&\dfrac{\partial v_1}{\partial x_3}\\\dfrac{\partial v_2}{\partial x_1}&\dfrac{\partial v_2}{\partial x_2}&\dfrac{\partial v_2}{\partial x_3}\\\dfrac{\partial v_3}{\partial x_1}&\dfrac{\partial v_3}{\partial x_2}&\dfrac{\partial v_3}{\partial x_3}\end{bmatrix}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{A}\tag{4.1.7}$$

其中矩阵 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的元为

$$S_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right);\quad A_{ij}=(-1)^p\,\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}-\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)\tag{4.1.8}$$

式中，若 $i>j$，则 $p=0$；若 $i<j$，则 $p=1$. 显然矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的意义与弹性体类似，表示流体的变形. 我们来分析一下反对称张量的意义. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 只有 3 个独立的元素，令为 ω_1，ω_2 和 ω_3

$$\omega_1=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2}-\frac{\partial v_2}{\partial x_3}\right);\quad\omega_2=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_3}-\frac{\partial v_3}{\partial x_1}\right);\quad\omega_3=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1}-\frac{\partial v_1}{\partial x_2}\right)$$

显然有

$$\boldsymbol{\omega}=\frac{1}{2}\nabla\times\boldsymbol{v} \tag{4.1.9}$$

并且

$$\boldsymbol{A}\cdot\delta\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}0 & -\omega_3 & \omega_2\\ \omega_3 & 0 & -\omega_1\\ -\omega_2 & \omega_1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\delta x_1\\ \delta x_2\\ \delta x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\omega_2\delta x_3-\omega_3\delta x_2\\ \omega_3\delta x_1-\omega_1\delta x_3\\ \omega_1\delta x_2-\omega_2\delta x_1\end{bmatrix}=\boldsymbol{\omega}\times\delta\boldsymbol{r}$$

因此反对称部分表示流体绕过 P_0 点的瞬时转动轴转动而在 P 点引起的速度. 由方程(4.1.6),结合以上各式,我们得到

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r})=\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})+\delta\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r})+\frac{1}{2}\nabla\times\boldsymbol{v}\times\delta\boldsymbol{r}+\boldsymbol{S}\cdot\delta\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}} \tag{4.1.10}$$

即:流体在 P 点的速度可分为三部分:P_0 点的平动速度;流体绕 P_0 点转动在 P 点引起的速度;因流体变形在 P 点引起的速度. $\boldsymbol{S}$ 称为**应变率张量**,而 $\boldsymbol{A}$ 称为**旋转张量**. 注意:在弹性体的变形中,引入对称张量已经足够了. 因为反对称张量部分仅仅描述了弹性体作为刚体的转动,变形部分由对称张量描述,而在流体中,流体运动包括旋转(如涡旋),因此必须包括反对称张量部分.

例 4.1.1 证明流体的相对体积膨胀率为$\nabla\cdot\boldsymbol{v}$.

解: 设流体微元为边长等于 $\delta x_1=\delta x_2=\delta x_3=\delta x$ 的正方体,经 Δt 时间后,边长 δx_1、δx_2 和 δx_3 分别变成

$$\delta x_1+\frac{\partial v_1}{\partial x_1}\delta x_1\Delta t;\quad \delta x_2+\frac{\partial v_2}{\partial x_2}\delta x_2\Delta t;\quad \delta x_3+\frac{\partial v_3}{\partial x_3}\delta x_3\Delta t$$

于是相对体积膨胀率为

$$\frac{\left(\delta x+\frac{\partial v_1}{\partial x_1}\delta x\Delta t\right)\left(\delta x+\frac{\partial v_2}{\partial x_2}\delta x\Delta t\right)\left(\delta x+\frac{\partial v_3}{\partial x_3}\delta x\Delta t\right)-\delta x\delta x\delta x}{\delta x\delta x\delta x\Delta t}$$

$$\approx\frac{\partial v_1}{\partial x_1}+\frac{\partial v_2}{\partial x_2}+\frac{\partial v_3}{\partial x_3}=\nabla\cdot\boldsymbol{v}$$

故结论得证.

应力张量:当考虑流体的黏滞效应时,流体中任意一个面元上的应力与面元的法向 $\boldsymbol{n}$ 不一致,因此流体中的应力也必须用应力张量来表示

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}p_{11} & p_{12} & p_{13}\\ p_{21} & p_{22} & p_{23}\\ p_{31} & p_{32} & p_{33}\end{bmatrix} \tag{4.1.11}$$

面元上的应力为

$$\boldsymbol{p}_n=\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} \tag{4.1.12}$$

与固体一样,应力张量 $\boldsymbol{P}$ 是一个对称张量.

例 4.1.2　求静止流体和无黏性流体的应力张量.

解:　因静止流体不能承受切向应力,故流体中任何一个面元上的力都在法向且相同,否则流体不可能静止. 分别取 $\boldsymbol{n}_1=(0,0,1)$,$\boldsymbol{n}_2=(0,1,0)$ 和 $\boldsymbol{n}_3=(1,0,0)$,那么这三个面元上的力为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n}_1^{\mathrm{T}} &= p_{13}\boldsymbol{e}_1+p_{23}\boldsymbol{e}_2+p_{33}\boldsymbol{e}_3\equiv p_{33}\boldsymbol{e}_3\\ \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n}_2^{\mathrm{T}} &= p_{12}\boldsymbol{e}_1+p_{22}\boldsymbol{e}_2+p_{32}\boldsymbol{e}_3\equiv p_{22}\boldsymbol{e}_2\\ \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n}_3^{\mathrm{T}} &= p_{11}\boldsymbol{e}_1+p_{21}\boldsymbol{e}_2+p_{31}\boldsymbol{e}_3\equiv p_{11}\boldsymbol{e}_1\end{aligned}\tag{4.1.13}$$

由于只有法向应力,而要求切向应力为零,故非对角元素全为零:$p_{13}=p_{23}=0$、$p_{12}=p_{32}=0$ 和 $p_{21}=p_{31}=0$;又要求所有面元上的法向应力相等:$p_{11}=p_{22}=p_{33}=-p$(负号表示流体受到压力),p 为压强. 于是静止流体的应力张量为

$$\boldsymbol{P}=-\begin{bmatrix}p&0&0\\0&p&0\\0&0&p\end{bmatrix}=-p\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}=-p\boldsymbol{I}\tag{4.1.14}$$

或者写成 $P_{ik}=-p\delta_{ik}(i,k=1,2,3)$. 无黏性流体不能承受切向应力,因此它的应力张量与静止流体相同.

本构方程:与固体类似,应力张量与应变率张量也存在一一对应的关系,这个关系反映了流体的基本性质,称为**本构方程**,就像固体中应力张量与应变张量存在广义 Hooke 定律.

假设:①应力张量是应变率张量的线性函数;②流体是各向同性的,流体的性质与方向无关;③当流体静止时,应变率为零,流体中的应力就是流体的静压强. 根据这三个基本假定,下面导出本构方程.

由假设 1,应力张量可以写成

$$\boldsymbol{P}=a\boldsymbol{S}+b\boldsymbol{I}\tag{4.1.15}$$

为了决定系数 a,考虑特殊情况:流体沿 x_1 方向流动,在 x_2 方向有速度梯度,两层流体间的切向应力由牛顿黏滞定律决定

$$p_{12}=\mu\frac{\partial v_1}{\partial x_2}=2\mu S_{12}\tag{4.1.16}$$

其中 μ 为**黏滞系数**. 比较(4.1.15)和(4.1.16)二式可见:$a=2\mu$. 又由方程(4.1.15)得到

$$p_{11}=2\mu\frac{\partial v_1}{\partial x_1}+b;\quad p_{22}=2\mu\frac{\partial v_2}{\partial x_2}+b;\quad p_{33}=2\mu\frac{\partial v_3}{\partial x_3}+b$$

把以上三个式子相加得到

$$\begin{aligned}p_{11}+p_{22}+p_{33}&=2\mu\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1}+\frac{\partial v_2}{\partial x_2}+\frac{\partial v_3}{\partial x_3}\right)+3b\\&=2\mu\nabla\cdot\boldsymbol{v}+3b\end{aligned}\tag{4.1.17}$$

即

$$b=\frac{1}{3}(p_{11}+p_{22}+p_{33})-\frac{2}{3}\mu\nabla\cdot\boldsymbol{v} \tag{4.1.18}$$

因此

$$\boldsymbol{P}=2\mu\boldsymbol{S}+\left[\frac{1}{3}(p_{11}+p_{22}+p_{33})-\frac{2}{3}\mu\nabla\cdot\boldsymbol{v}\right]\boldsymbol{I} \tag{4.1.19}$$

当流体静止时，$\boldsymbol{P}$ 为式(4.1.14)，故(4.1.19)式中$(p_{11}+p_{22}+p_{33})/3$ 一定包含 $-p$. 另一方面，$(p_{11}+p_{22}+p_{33})$是应力张量的不变量，根据各向同性假设，它应该与应变率张量的不变量 $S_{11}+S_{22}+S_{33}=\nabla\cdot\boldsymbol{v}$ 有关，因此令

$$\frac{1}{3}(p_{11}+p_{22}+p_{33})=-p+\mu'\nabla\cdot\boldsymbol{v} \tag{4.1.20}$$

于是

$$\boldsymbol{P}=2\mu\boldsymbol{S}+[-p+\lambda\nabla\cdot\boldsymbol{v}]\boldsymbol{I} \tag{4.1.21}$$

其中 $\lambda=(\mu'-2\mu/3)$. 因为$\nabla\cdot\boldsymbol{v}$ 为相对体积膨胀率，故 λ 称为**体膨胀黏度系数**，有时也称为**第二黏度系数**. 上式就是应力张量与应变率张量的关系. 它是在牛顿黏滞定律的基础上，引入了三个假设而得到的. 该公式对多数的流体适用. 满足以上本构关系的流体称为**牛顿流体**.

4.2 动力学方程、守恒定律和流体中的波

流体的运动必须遵守的基本定律包括：质量守恒定律、动量守恒定律、动量矩守恒定律、能量守恒定律（热力学第一定律）和熵不等式（热力学第二定律），其中前三个是力学定律，后两个是热力学定律（见第 19 章讨论）. 由于流体运动常常有热过程参与，涉及到热力学量，故要用到后两个定律. 另外，为了从这些基本定律求出流体的状态，还必须增加描写具体流体特性的方程，即本构方程和状态方程. 当然，对不同的流体运动，不一定需要所有的定律. 例如对不可压缩流体、无热效应的流动，前两个定律就足够了.

质量守恒方程：在流体中任取体积 V(如图 4.2.1)，体积 V 中总质量的变化率应该等于流出的流体，即

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=-\oint_S\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{4.2.1}$$

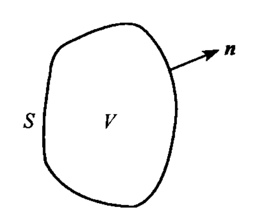


图 4.2.1 流体中的体元

其中 $\boldsymbol{j}$ 为质量流矢量：$\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}$，利用 Gauss 公式，(4.2.1)式变成

$$\int_V\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0 \tag{4.2.2}$$

由体积 V 的任意性，得到质量守恒方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \tag{4.2.3}$$

动量守恒方程：假定流体受到外力作用，单位质量的力密度为 $\boldsymbol{f}$，体积元的总动量变化率应该等于流出的动量与合力（外力和表面 S 上的应力）之和

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho \boldsymbol{v} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = -\oint_S \boldsymbol{\Xi} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \left[\int_V \rho \boldsymbol{f} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} + \oint_S \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} \mathrm{d}S\right] \tag{4.2.4}$$

式中右边第三项面积分为体积 V 的流体表面 S 上的应力，$\boldsymbol{\Xi}$ 为动量流张量：$\boldsymbol{\Xi}=\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}$，写成矩阵形式，它的元素为 $(\boldsymbol{\Xi})_{ik}=\rho v_i v_k (i,k=1,2,3)$. 注意：标量的流为矢量，矢量的流一定是张量，张量的这一形式也称为**并矢**. 上式面积分化成体积分

$$\int_V \left[\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Xi}\right] \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = \int_V (\rho \boldsymbol{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{P}) \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \tag{4.2.5}$$

由体积 V 的任意性，得到动量守恒方程

$$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{v})}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Xi} = \rho \boldsymbol{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{P} \tag{4.2.6}$$

利用张量运算恒等式 $\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)(\rho \boldsymbol{v}) + \rho \boldsymbol{v} \nabla \cdot \boldsymbol{v}$ 和方程(4.2.3)，上式可改为

$$\rho \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \rho \boldsymbol{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{P} \tag{4.2.7}$$

如果外力 $\boldsymbol{f}=0$，式(4.2.6)改写成标准的守恒形式

$$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{v})}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{\Pi} = 0 \tag{4.2.8}$$

其中 $\boldsymbol{\Pi}$ 为包括了表面应力的动量流密度张量：$\boldsymbol{\Pi}=\boldsymbol{\Xi}+\boldsymbol{P}$. 由式(4.1.21)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{P} = \nabla \cdot (2\mu \boldsymbol{S}) + [-\nabla p + \nabla(\lambda \nabla \cdot \boldsymbol{v})] \tag{4.2.9}$$

于是方程(4.2.7)变成

$$\rho \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \rho \boldsymbol{f} + \nabla \cdot (2\mu \boldsymbol{S}) + [-\nabla p + \nabla(\lambda \nabla \cdot \boldsymbol{v})] \tag{4.2.10}$$

称为 **Navier-Stokes 方程**. 如果 μ 和 λ 为常数，利用 $\nabla \cdot \boldsymbol{S} = \nabla^2 \boldsymbol{v}/2$，上式简化成

$$\rho \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \rho \boldsymbol{f} - \nabla p + \mu \nabla^2 \boldsymbol{v} + \lambda \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{v}) \tag{4.2.11}$$

如果 μ 和 λ 都为零，上式变成

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \rho(\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} = \rho \boldsymbol{f} - \nabla p \tag{4.2.12}$$

利用 $(\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} = \nabla(v^2/2) - \boldsymbol{v} \times (\nabla \times \boldsymbol{v})$ 得到

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \frac{1}{\rho}\nabla p + \nabla\left(\frac{1}{2}v^2\right) - \boldsymbol{v} \times (\nabla \times \boldsymbol{v}) = \boldsymbol{f} \tag{4.2.13}$$

称为流体动力学的 **Euler 方程**. 注意：由于存在非线性对流项 $\boldsymbol{v} \cdot \nabla$，Navier-Stokes 方程和 Euler 方程都是非线性方程. 一个特殊情况是流体处于平衡状态，此时 $v=$

0，于是方程(4.2.10)简化为

$$\rho \boldsymbol{f} = \nabla p \tag{4.2.14}$$

动量矩守恒方程：体积元的总动量矩变化率应该等于流出的动量矩与合力(外力和表面 S 上的应力)的动量矩(相对于原点)之和

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = -\oint_S \boldsymbol{\Xi}_\mathrm{m} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \left[\int_V \rho \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{f} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} + \oint_S \boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{n}^\mathrm{T}) \mathrm{d}S\right]$$

其中 $\boldsymbol{\Xi}_\mathrm{m}$ 为动量矩流张量：$\boldsymbol{\Xi}_\mathrm{m} = (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v})\rho \boldsymbol{v}$，同样上式可化成

$$\int_V \rho \boldsymbol{r} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = \int_V \rho \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{f} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} + \oint_S \boldsymbol{r} \times (\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{n}^\mathrm{T}) \mathrm{d}S \tag{4.2.15}$$

设由应力张量构成的三个矢量为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{p}_1 &= p_{11}\boldsymbol{e}_1 + p_{12}\boldsymbol{e}_2 + p_{13}\boldsymbol{e}_3 \\ \boldsymbol{p}_2 &= p_{21}\boldsymbol{e}_1 + p_{22}\boldsymbol{e}_2 + p_{23}\boldsymbol{e}_3 \\ \boldsymbol{p}_3 &= p_{31}\boldsymbol{e}_1 + p_{32}\boldsymbol{e}_2 + p_{33}\boldsymbol{e}_3 \end{aligned} \tag{4.2.16}$$

可以验证式(4.2.15)的面积分可化成体积分，于是

$$\int_V \rho\left(\boldsymbol{r} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{f}\right)\mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = \int_V \left[\frac{\partial(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_3)}{\partial x_3}\right]\mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}$$

由体积 V 的任意性，得到动量矩守恒方程

$$\rho \boldsymbol{r} \times \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} - \rho \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{f} = \frac{\partial}{\partial x_1}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_1) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_2) + \frac{\partial}{\partial x_3}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_3) \tag{4.2.17}$$

由于

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x_1}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_1) + \frac{\partial}{\partial x_2}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_2) + \frac{\partial}{\partial x_3}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}_3) \\ &= \boldsymbol{r} \times \left(\frac{\partial \boldsymbol{p}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \boldsymbol{p}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \boldsymbol{p}_3}{\partial x_3}\right) + (\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{p}_1) + (\boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{p}_2) + (\boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{p}_3) \\ &= \boldsymbol{r} \times (\nabla \cdot \boldsymbol{P}) + (\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{p}_1) + (\boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{p}_2) + (\boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{p}_3) \end{aligned}$$

代入方程(4.2.17)

$$\boldsymbol{r} \times \left(\rho \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} - \rho \boldsymbol{f} - \nabla \cdot \boldsymbol{P}\right) = (\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{p}_1) + (\boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{p}_2) + (\boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{p}_3) \tag{4.2.18}$$

左边利用动量守恒方程(4.2.7)为零，右边要求应力张量具有对称性：$p_{ik} = p_{ki}$. 因此动量矩守恒方程并没有新的内容.

能量守恒方程：如果一个实际问题有热过程参与运动，能量守恒方程就不必可少. 而且除了求流体的速度场外，还必须求温度场的分布. 流体元的能量密度包括三部分：单位质量的内能 e、单位质量的动能 $v^2/2$ 和单位质量的重力势能 gx_3，这里，我们用 x_3 表示流体元的高度. 体积元的总能量变化率应该等于：①面上流出的能量；②合力(外力和表面 S 上的应力)作功；③由于热辐射增加的能量；④热传导从面上流出的热量，即

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\varepsilon \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = -\oint_S \boldsymbol{j}_\varepsilon \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \oint_S (\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}S + \int_V \rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \int_V \rho q \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} - \oint_S \boldsymbol{q}_t \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{4.2.19}$$

其中

$$\varepsilon = e + \frac{1}{2}v^2 + gx_3 \tag{4.2.20}$$

$\boldsymbol{f}$ 为单位质量外力合力(除重力)，$\boldsymbol{j}_\varepsilon = \rho\varepsilon\boldsymbol{v}$ 为能量流密度矢量，q 为单位时间内由辐射传入单位质量流体的热量，$\boldsymbol{q}_t$ 为热流矢量. 方程(4.2.19)中右边面积分化成体积分

$$\begin{aligned} &-\oint_S \boldsymbol{j}_\varepsilon \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \oint_S (\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}S - \oint_S \boldsymbol{q}_t \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \\ &= \int_V [-\nabla\cdot\boldsymbol{j}_\varepsilon - \nabla\cdot\boldsymbol{q}_t + \nabla\cdot(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{v})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \end{aligned} \tag{4.2.21}$$

由体积 V 的任意性，得到能量守恒方程

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j}_\varepsilon = \nabla\cdot(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{v}) + \rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v} - \nabla\cdot\boldsymbol{q}_t + \rho q \tag{4.2.22}$$

利用连续性方程(4.2.3)，上式可以改写为全导数形式

$$\rho\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = \nabla\cdot(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{v}) + \rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v} - \nabla\cdot\boldsymbol{q}_t + \rho q \tag{4.2.23}$$

由 Fourier 热传导定律，$\boldsymbol{q}_t = -\kappa\nabla T$，其中 κ 为热导系数，$T = T(\boldsymbol{r}, t)$ 为温度场分布，则方程(4.2.23)成为

$$\rho\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}t} = \nabla\cdot(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{v}) + \rho\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v} + \nabla\cdot(\kappa\nabla T) + \rho q \tag{4.2.24}$$

状态方程：在以上的讨论中，涉及到了温度、压强和密度(与流体的体积有关)等宏观参量. 如果假定流体处于热动平衡状态(见第 19 章讨论)，由热力学知道，这些宏观参量有一定的内在联系，称为状态方程，如 $p = p(T, \rho)$，或者 $p = p(s, \rho)$，其中 s 为单位质量的熵. 状态方程的建立必须通过实验确定或者由统计物理学从理论上推导出来.

例 4.2.1　求转动参考系中流体的运动方程.

解：　由方程(1.4.26)，非惯性参考系中加速度的表达式为

$$\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{a}_t + \boldsymbol{a}_c \tag{4.2.25}$$

其中 $\boldsymbol{a}$ 为相对加速度，$\boldsymbol{a}_t$ 为牵引加速度

$$\boldsymbol{a}_t = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}) - \omega^2\boldsymbol{r} \tag{4.2.26}$$

$\boldsymbol{a}_c$ 为科里奥利加速度

$$\boldsymbol{a}_c = 2\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{v}_r \tag{4.2.27}$$

其中 $\boldsymbol{v}_r$ 为相对于非惯性参考系的流体速度. 于是方程(4.2.7)中的力密度应减去惯性离心力和科里奥利力

$$\rho \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}_r}{\mathrm{d}t} = \rho(\boldsymbol{f} - \boldsymbol{a}_t - \boldsymbol{a}_c) + \nabla \cdot \boldsymbol{P} \tag{4.2.28}$$

流体中的小振幅波:流体中同样存在回复力,当流体中的某一部分受到小的扰动,扰动以波的形式在流体介质中传播. 无界空间的流体在忽略黏滞的情况下,只能传播纵波,即密度波(或压力波). 在流体的表面(如水表面),也能传播所谓的水表面波,但与固体表面波不同,这里的回复力是重力. 而在固体情形,重力相对于固体张力可忽略不计. 当两种不同的流体形成界面时,同样可以传播界面波. 我们仅讨论无黏滞流体中小扰动的传播.

如果流体质点偏离平衡位置的幅度很小,令 $\rho=\rho_0+\rho'$, $p=p_0+p'$ 和 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_0+\boldsymbol{v}'$,其中 ρ_0、p_0 和 $\boldsymbol{v}_0$ 分别是平衡点的密度、压强和速度,假定它们与空间坐标无关. 显然,在小扰动条件下,p'、$\boldsymbol{v}'$ 和 ρ' 是二级小量. 由方程(4.2.3)和(4.2.7)

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{v}' = 0; \quad \rho_0 \frac{\partial \boldsymbol{v}'}{\partial t} + \nabla p' = \rho_0 \boldsymbol{f} \tag{4.2.29}$$

以上二式消去 $\boldsymbol{v}'$ 得到

$$\frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} - \nabla^2 p' = -\rho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{f} \tag{4.2.30}$$

另一方面,假定流体小扰动过程是绝热过程,即流体压缩和膨胀的周期比热传导时间短得多,相邻媒质间没有热量交换,故熵不变. 于是状态方程为

$$p' = \left[\frac{\partial p(s,\rho)}{\partial \rho}\right]\bigg|_s \rho' \equiv c^2 \rho' \tag{4.2.31}$$

代入式(4.2.30)得到

$$\nabla^2 p' - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} = \rho_0 \nabla \cdot \boldsymbol{f} \tag{4.2.32}$$

式(4.2.32)即为流体中小扰动的波动方程,即**声波方程**,式 c 为声速.

得到方程(4.2.32),已假定 p'、$\boldsymbol{v}'$ 和 ρ' 都是二级小量,因而方程(4.2.29)成立. 事实上,直接从质量守恒方程(4.2.3)和动量守恒方程(4.2.6)可推出更一般的波动方程. 由质量守恒方程(4.2.3)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}) = 0 \tag{4.2.33}$$

以及动量守恒方程(4.2.6)并假定外力为零

$$\frac{\partial (\rho \boldsymbol{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}) = \nabla \cdot \boldsymbol{P} \tag{4.2.34}$$

式(4.2.33)和(4.2.34)消去 $\rho \boldsymbol{v}$ 得到

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \nabla\nabla : (\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{P}) \tag{4.2.35}$$

左右两边同时减去 $c^2 \nabla^2 \rho$ 得到

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \rho = \nabla\nabla : (\rho \boldsymbol{v}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{P} - c^2 \rho \boldsymbol{I}) \tag{4.2.36}$$

写成分量形式即为

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \rho = \frac{\partial^2 T_{ik}}{\partial x_i \partial x_k} \tag{4.2.37}$$

其中 $T_{ik} = \rho v_i v_k - P_{ik} - c^2 \rho \delta_{ik}$. 上式称为 **Lighthill 方程**. 在忽略黏滞情况下，$P_{ik} = -p\delta_{ik}$，因

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k}(-P_{ik} - c^2 \rho \delta_{ik}) \approx \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i}(p - c^2 \rho) \approx \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_i}(p' - c^2 \rho') \approx 0$$

故方程(4.2.37)简化为

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - c^2 \nabla^2 \rho = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k}(\rho v_i v_k) \tag{4.2.38}$$

上式右边仍然含有密度和速度场，但可用微扰法求解. 式(4.2.38)在流体湍流引起噪声的研究中非常有用，如研究喷气式飞机引起的噪声. 假定流体湍流的速度场为 $v_0(\boldsymbol{r}, t)$，那么由方程(4.2.31)和(4.2.38)，产生的噪声满足

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} - \nabla^2 p' = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k}(\rho_0 v_{0i} v_{0k}) \tag{4.2.39}$$

因此可把方程(4.2.38)的右边当作源项来处理.

4.3　流体运动的相似律和 Reynolds 数

流体运动方程的求解是十分困难的，即使流体是不可压缩的. 除了极少数特殊情形外，根本无法求得它的解析解. 因此为了解决工程实际问题，需要进行各种模拟实验. 模拟实验中一般采用缩小了的模型，于是就产生了问题：为了保持模拟流场与实物流场之间的一定对应关系，或者说相似性，实验中的各种特征参数(如流体黏滞性质和来流速度)要不要相应变化呢？模拟实验测量出的各种数据又需要怎样换算才能给出实物上的对应值？这些问题可以由“相似律”来解决. 所谓两个流动现象彼此相似，有以下四个不同的层次：

1. 几何相似：两流场中被绕流物体和流场中各对应线元之间夹角相等，且对应长度成比例. 分别取模型与实物的特征长度和特征时间构成无量纲量，那么两流场中无量纲坐标和无量纲时间相同的点称为时空对应点；

2. 运动相似：两个几何相似的流场中时空对应点上的速度方向相同，大小成

比例；

3. 动力相似：两个运动相似的流场中时空对应点上对应面元所受的力方向相同，大小成比例；

4. 热力学相似：两个动力相似的流场中时空对应点上的温度成比例，通过对应点上对应面元的热流方向相同，大小成比例.

对不同的工程问题，我们提出不同层次的相似要求，如果只要知道物体所受的流体作用力而对传热不感兴趣，那就只需令模型流场与实物流场动力相似就可以了.

需要特别指出的是：几何相似并不能保证两个流场之间动力相似，除非用同样性质的流体. 相似条件与具体的流体力学问题有关，不同的问题有不同的相似条件. 我们以下列问题为例来说明两个流场的相似条件.

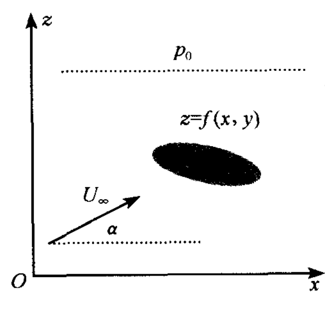


图 4.3.1　相似律

重力场中黏滞系数为常数的不可压缩流体绕过某一物体，其曲面形状为 $z=f(x,y)$. 假定来流速度 U_∞ 在 xOz 平面且与 x 轴成 α 角，重力指向 z 轴负向，流体自由面上方为大气压 p_0，如图 4.3.1. 对不可压缩流体 $\rho=$ 常数，由质量守恒方程和式(4.2.11)，问题的数学表达为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v}=0;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=-\rho g\boldsymbol{e}_k-\frac{1}{\rho}\nabla p+\nu\nabla^2\boldsymbol{v} \tag{4.3.1}$$

其中 $\nu=\mu/\rho$ 称为**运动黏滞度系数**. 边界条件和初始条件为

固体-流体边界：当 $z=f(x,y)$ 时，$\boldsymbol{v}=0$；无限远处边界

$$\boldsymbol{v}=U_\infty(\cos\alpha\boldsymbol{e}_x+\sin\alpha\boldsymbol{e}_z),\quad (r\to\infty) \tag{4.3.2}$$

自由面边界：当 $z=z_0$ 时，$p=p_0$；初始分布：

$$\boldsymbol{v}\,|_{t=0}=\boldsymbol{v}_0(x,y,z,0);\quad p\,|_{t=0}=p_0(x,y,z,0) \tag{4.3.3}$$

首先进行无量纲化，令

$$\begin{aligned}x'&=\frac{1}{L}x;\quad y'=\frac{1}{L}y;\quad z'=\frac{1}{L}z\\ t'&=\frac{1}{t_0}t;\quad v'=\frac{v}{U_\infty};\quad p'=\frac{p}{\rho U_\infty^2}\end{aligned} \tag{4.3.4}$$

其中 L 为表征物体线度的参数，t_0 为表征流体力学过程的时间参数. 上式代入方程(4.3.1)得到

$$\nabla'\cdot\boldsymbol{v}'=0;\quad S\frac{\partial\boldsymbol{v}'}{\partial t'}+(\boldsymbol{v}'\cdot\nabla')\boldsymbol{v}'=-\frac{1}{F}\boldsymbol{e}_k-\nabla'p'+\frac{1}{Re}\nabla'^2\boldsymbol{v}' \tag{4.3.5}$$

其中三个无量纲参数定义为

$$S=\frac{L}{U_{\infty}t_0};\quad F=\frac{U_{\infty}^2}{gL};\quad Re=\frac{\rho U_{\infty}L}{\mu} \tag{4.3.6}$$

其中 Re 称为 **Reynolds 数**，与黏滞系数有关，是流体力学中一个重要的参数. 显然 Re 表征黏滞力与惯性力的相对大小，F 表征重力与惯性力的相对大小，而 S 表征非定常效应的重要性. 同样边界条件和初始条件的无量纲化

$$z'=\frac{1}{L}f(Lx',Ly')\equiv f'(x',y');\quad z'=\frac{1}{L}z_0\equiv z_0' \tag{4.3.7a}$$

$$p'=\frac{p_0}{\rho U_{\infty}^2}\equiv E;\quad \boldsymbol{v}'=(\cos\alpha\boldsymbol{e}_x+\sin\alpha\boldsymbol{e}_z),\quad r\to\infty \tag{4.3.7b}$$

和

$$\boldsymbol{v}'|_{t=0}=U_{\infty}\boldsymbol{v}_0(Lx',Ly',Lz',0)\equiv\boldsymbol{v}_0'(x',y',z') \tag{4.3.8a}$$

$$p'|_{t=0}=\frac{1}{\rho U_{\infty}^2}p_0(Lx',Ly',Lz',0)\equiv p_0'(x',y',z') \tag{4.3.8b}$$

因此两个几何相似(即上式中 f' 和 z_0' 相同)的流场彼此动力相似的条件是：

1. 相同的相似参数：S、F、E 和 Re；
2. 相同的攻角 α；
3. 相同的无量纲化初始条件.

为了进一步说明 Reynolds 数 Re 表征黏滞力与惯性力的相对大小，以非线性对流项中 $\rho u\partial u/\partial x$ 代表惯性力，黏滞项中 $\mu\partial^2u/\partial y^2$ 代表黏滞力. u、$\partial u/\partial x$ 和 $\partial^2u/\partial x^2$ 的量级分别为：U_{∞}、$U_{\infty}L^{-1}$ 和 $U_{\infty}L^{-2}$，故惯性力与黏滞力之比为

$$\frac{\rho u\dfrac{\partial u}{\partial x}}{\mu\dfrac{\partial^2u}{\partial y^2}}=\frac{\rho U_{\infty}^2L^{-1}}{\mu U_{\infty}L^{-2}}=\frac{\rho U_{\infty}L}{\mu}\equiv Re \tag{4.3.9}$$

可见 Reynolds 数 Re 确实表征了黏滞力与惯性力的相对大小. Reynolds 数不仅是相似准则，而且还是区别黏滞流体流动属于什么运动形态的唯一参数. Reynolds 数大小的具体例子：①气象中雨滴降落，$Re\leqslant1$(小 Reynolds 数)；②轴承中润滑理论，$Re\sim100$(中 Reynolds 数)；③空气动力学的扰动问题，$R\sim10^6$(大 Reynolds 数).

4.4　流体的基本运动：涡旋、层流和湍流

本节简单介绍流体的涡旋运动、无黏滞不可压缩流体的无旋运动和黏滞不可压缩流体的层流，以及流体的湍流运动.

首先介绍描写流体流动的几个概念.

流线：用来描述流场中各点流动方向的曲线. 它是某时刻速度场中的一条矢量线，在线上任一点的切线方向与该点在该时刻的速度矢量方向一致. 某一时刻 t 在

一流线上取一段元 d$\boldsymbol{r}$，由流线的定义，应有：d$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}=0$，其分量形式为

$$\frac{dx_1}{v_1(x_1,x_2,x_3,t)}=\frac{dx_2}{v_2(x_1,x_2,x_3,t)}=\frac{dx_3}{v_3(x_1,x_2,x_3,t)} \tag{4.4.1}$$

(4.4.1)式即为决定速度场 $\boldsymbol{v}$ 中流线的方程.

流管：在速度场中任画一闭合曲线，通过闭合曲线上每一点作出流线，这些流线形成管状曲面，叫做流管. 由于流线不相交，流体的质点不可能穿过流管的“壁”（如果相交，相交点就有二个流速，这就破坏了唯一性）.

涡量：定义流体速度的旋度为流场的涡量，记作 $\boldsymbol{\omega}$

$$\boldsymbol{\omega}=\nabla\times\boldsymbol{v} \tag{4.4.2}$$

涡量 $\boldsymbol{\omega}$ 是与空间和时间有关的矢量场，称为**涡量场**.

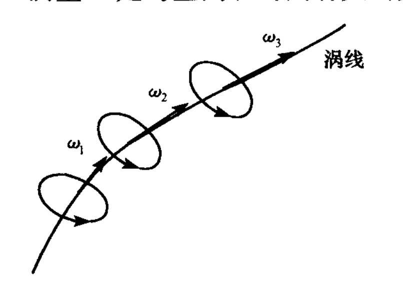


图 4.4.1 涡线

涡线：某时刻涡量场中的一条矢量线，在线上任一点的切线方向与该点在该时刻的涡量矢量方向一致，如图 4.4.1. 涡线的方程与式(4.4.1)类似

$$\frac{dx_1}{\omega_1}=\frac{dx_2}{\omega_2}=\frac{dx_3}{\omega_3} \tag{4.4.3}$$

涡管：在涡量场中任画一条非涡线的闭合曲线，则在同一时刻通过闭合曲线上每一点作出涡线，这些涡线形成管状曲面，叫做涡管.

速度环量：对流场的任意闭合曲线 L，速度环量定义为线积分

$$\Gamma=\oint_L \boldsymbol{v}\cdot d\boldsymbol{l} \tag{4.4.4}$$

涡通量：对流场的任意曲面 S，涡通量定义为面积分

$$J=\oint_S \boldsymbol{\omega}\cdot d\boldsymbol{S} \tag{4.4.5}$$

下面介绍流体流动的几种形式.

1. **无黏滞流体的涡旋运动**：对无黏滞流体的涡旋运动，流体动力学方程即为 Euler 方程(4.2.13)

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}+\frac{1}{\rho}\nabla p+\nabla\left(\frac{1}{2}v^2\right)-\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{v})=\boldsymbol{f} \tag{4.4.6}$$

(4.4.6)式两边求旋度，注意到$\nabla\cdot\omega=\nabla\cdot(\nabla\times\boldsymbol{v})\equiv 0$，可得

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{\omega}-(\boldsymbol{\omega}\cdot\nabla)\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\omega}(\nabla\cdot\boldsymbol{v})=\nabla\times\boldsymbol{f}-\nabla\times\left(\frac{1}{\rho}\nabla p\right) \tag{4.4.7}$$

进一步假定：①体力密度有势（如重力），即存在标量势函数 Φ，使 $\boldsymbol{f}=\nabla\Phi$；②压强仅是密度的函数（称为**正压流体**），即 $p=p(\rho)$或者 $\rho=\rho(p)$，故可定义压强函数

$$P=\int\frac{dp}{\rho(p)};\quad dP=\frac{dp}{\rho(p)} \tag{4.4.8}$$

即

$$\mathrm{d}P = (\nabla P)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{1}{\rho}(\nabla p)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{4.4.9}$$

由 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 的任意性：$\rho^{-1}(\nabla p)=\nabla P$. 在这二个假定下，方程(4.4.7)简化为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}}{\mathrm{d}t} - (\boldsymbol{\omega}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} + \boldsymbol{\omega}(\nabla\cdot\boldsymbol{v}) = 0 \tag{4.4.10}$$

这就是涡量满足的基本方程，而且此时速度环量守恒. 证明：把 Euler 方程写成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f} - \frac{1}{\rho}\nabla p \tag{4.4.11}$$

因为 $\boldsymbol{f}$ 有势且流体是正压流体，故上式为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \nabla(\Phi - P) \tag{4.4.12}$$

速度环量的时间变化率为

$$\frac{\mathrm{d}\Gamma}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\oint_L \boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = \oint_L \nabla(\Phi - P)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = 0 \tag{4.4.13}$$

即速度环量守恒. 又

$$\Gamma = \oint_L \boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = \oint_S (\nabla\times\boldsymbol{v})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \oint_S \boldsymbol{\omega}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{4.4.14}$$

由 S 和 L 的任意性，速度环量守恒意味着涡通量守恒. 如果开始时，流体中没有涡旋 $\boldsymbol{\omega}=0$，那么以后也不可能有涡旋！注意，这一结论成立的条件：无黏滞流体；体力密度有势(如重力作用)；正压流体.

需要特别指出的是：不能根据流线是否形成闭合环状来判断速度场是否有旋. 下面举一例说明.

例 4.4.1　流体的速度场为 $\boldsymbol{v}=y\boldsymbol{e}_x$，求流线、旋度和涡线.

解：　由方程(4.4.1)，流线的方程为

$$\frac{\mathrm{d}x}{y} = \frac{\mathrm{d}y}{0} = \frac{\mathrm{d}z}{0} \tag{4.4.15}$$

即 $y\mathrm{d}y=0$ 和 $y\mathrm{d}z=0$，流线为：$y=$常数和 $z=$常数. 另一方面

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla\times\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{e}_z \tag{4.4.16}$$

同样可求得涡线：$x=$常数和 $y=$常数. 可见流线和涡线分别为平行于 x 和 z 轴的直线，但这个流场处处有旋！反过来，即使流线形成闭合环状，也不一定有旋.

2. **无黏滞、不可压缩流体的无旋运动**：无黏滞、不可压缩流体的无旋运动是流体运动的最简单状态. 因流体作无旋运动：$\nabla\times\boldsymbol{v}=0$，故可定义势函数 φ，$\boldsymbol{v}=\nabla\varphi$；又流体是不可压缩的：$\rho=$常数. 由质量守恒方程：$\nabla\cdot\boldsymbol{v}=0$. 因此无黏滞、不可压缩流体作无旋运动的基本方程为

$$\begin{gathered}\nabla^2\varphi = 0;\quad \boldsymbol{v} = \nabla\varphi\\ \frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} + \frac{1}{\rho}\nabla p + \nabla\left(\frac{1}{2}v^2\right) = \boldsymbol{f}\end{gathered} \tag{4.4.17}$$

如果体力密度有势且流体为正压流体,(4.4.17)式第二个方程简化成

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\frac{1}{2}v^2+\frac{p}{\rho}+\Phi=c(t) \tag{4.4.18}$$

其中 $c(t)$ 是任意函数. 称为 **Lagrange 积分**. 对有限空间问题,方程(4.4.17)必须加上初始条件: $\boldsymbol{v}|_{t=0}=\boldsymbol{v}_0$; $p|_{t=0}=p_0$, 以及边界条件. 在无黏滞情况,固体-流体边界条件为法向速度连续,而切向速度任意. 这与黏滞流体有很大的区别. 对黏滞流体,流体黏着在固体边界上,不仅仅法向速度连续,而且同时要求切向速度也连续,即在固体-流体边界上,流体的速度必须等于固体的速度. 对无黏滞流体,这是不可能同时满足的.

例 4.4.2 密度为 ρ 的无黏滞、不可压缩流体的均匀来流,绕过一半径为 a 的无限长直圆柱,来流速度为 U_∞,没有环量. 求速度场分布及圆柱表面的压强.

解: 速度势满足 Laplace 方程,在二维柱坐标系中

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\vartheta^2}=0 \tag{4.4.19}$$

无限远处边界条件: $\boldsymbol{v}=\nabla\varphi=U_\infty\boldsymbol{e}_x(r\to\infty)$, 即 $\varphi(r,\vartheta)|_{r\to\infty}=U_\infty r\cos\vartheta$; 在圆柱边界上,法向速度为零. 方程(4.4.19)的通解为

$$\varphi(r,\vartheta)=e_0\vartheta+f_0\ln r+\sum_{m=0}^{\infty}(a_m r^m+b_m r^{-m})(c_m\cos m\vartheta+d_m\sin m\vartheta) \tag{4.4.20}$$

因为没有环量: $e_0=0$; 由无限远处边界条件: $m=1$ 且 $d_m=0$, 故

$$\varphi(r,\vartheta)=f_0\ln r+\left(a_1 r+b_1\frac{1}{r}\right)\cos\vartheta \tag{4.4.21}$$

利用无限远处边界条件得到 $f_0=0, a_1=U_\infty$; 由圆柱上边界条件得到 $b_1=U_\infty a^2$. 故速度势为

$$\varphi(r,\vartheta)=U_\infty\left(r+\frac{a^2}{r}\right)\cos\vartheta \tag{4.4.22}$$

因此速度场为

$$v_r(r,\vartheta)=U_\infty\left(1-\frac{a^2}{r^2}\right)\cos\vartheta;\quad v_\vartheta(r,\vartheta)=-U_\infty\left(1+\frac{a^2}{r^2}\right)\sin\vartheta$$

在圆柱壁上

$$v_r(r,\vartheta)|_{r=a}=0;\quad v_\vartheta(r,\vartheta)|_{r=a}=-2U_\infty\sin\vartheta \tag{4.4.23}$$

由方程(4.4.18)并注意到定常流动与时间无关,得到圆柱表面的压强满足

$$\frac{1}{2}U_\infty^2+\frac{p_\infty}{\rho}=\left(\frac{1}{2}v^2+\frac{p}{\rho}\right)\bigg|_{r=a} \tag{4.4.24}$$

因此

$$p\,|_{r=a} = p_\infty + \frac{1}{2}\rho(U_\infty^2 - v^2\,|_{r=a}) = p_\infty + \frac{1}{2}\rho U_\infty^2(1 - 4\sin^2\vartheta) \tag{4.4.25}$$

从式(4.4.23)可见,流体在圆柱面上存在切向速度.

3. **黏滞不可压缩流体的层流**:黏滞不可压缩流体的运动状态是层流(即流线层次分明,互相平行)还是湍流(即流体质点无规律运动,流体中含有大量的无规则的三维涡旋),主要取决于 Reynolds 数的大小,Reynolds 数越大,流动越容易处于湍流状态. Reynolds 数作为层流到湍流的决定参数,其物理本质是:当 Reynolds 数较小时,黏滞力大于惯性力,此时流动是稳定的,如果流体中有一个小的扰动,则扰动很快衰减;当 Reynolds 数较大时,惯性力大于黏滞力,此时流动是不稳定的,如果流体中有一个小的扰动,则扰动容易发展增强,形成湍流. 层流与湍流的规律和数学处理方法有很大的区别.

首先讨论简单的层流运动,此时不能定义势函数了,但仍然有 ρ=常数,由质量守恒方程:$\nabla\cdot\boldsymbol{v}=0$. 流体运动的基本方程为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0;\quad \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{v} \tag{4.4.26}$$

另外,流体的黏滞性必引起流体机械能量向热能的转化,因此还必须增加能量守恒方程. 必须指出:**黏滞不可压缩流体的运动一般是有旋的**. 事实上,因为 $\nabla^2\boldsymbol{v}=\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{v})-\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{v})=-\nabla\times\boldsymbol{\omega}$,如果流体运动无旋,那么 $\boldsymbol{\omega}=0$,即 $\nabla^2\boldsymbol{v}=0$. 故运动方程为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0;\quad \frac{\partial\boldsymbol{v}}{\partial t} + \frac{1}{\rho}\nabla p + \nabla\left(\frac{1}{2}v^2\right) = \boldsymbol{f} \tag{4.4.27}$$

其中已利用 $(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v}=\nabla(v^2/2)-\boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{v})=\nabla(v^2/2)$. 上式与无黏滞情况的方程(4.4.17)是完全一样的. 但边界条件不一样:在无黏滞情况下,方程(4.4.17)中的 $\boldsymbol{v}$ 仅要求满足法向速度连续,这样的解一般存在且唯一;而方程(4.4.27)中的 $\boldsymbol{v}$ 不仅仅要求法向速度连续,而且要求切向速度也连续,这样的解一般不存在. 故(4.4.26)没有无旋解.

例 4.4.3 平行平板间的黏滞流动:上板以常速度 U 沿 x 方向滑动,下板不动. 设 x 方向保持压差 P=常量,板间距离为 $2h$,上下板分别位于 $y=h$ 和 $y=-h$. 求流体的运动场和上下板受到的摩擦力.

解: 设速度场为 $\boldsymbol{v}=(u,v)$,基本方程为

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{4.4.28}$$

$$\begin{aligned} u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) \\ u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} &= -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} + \nu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right) \end{aligned} \tag{4.4.29}$$

边界条件为

$$\begin{aligned} y &= -h: u = 0, \quad v = 0 \\ y &= +h: u = U, \quad v = 0 \end{aligned} \tag{4.4.30}$$

由于 x 方向为无限，故流速与 x 无关，即 $\partial u/\partial x=0$，于是由式(4.4.28)得到：$\partial v/\partial y=0$，结合边界条件得到：$v\equiv 0$. 代入式(4.4.29)第二个方程得到：$\partial p/\partial y=0$. 于是流体的速度场和压强分布为

$$u = u(y), \quad v \equiv 0, \quad p = p(x) \tag{4.4.31}$$

代入式(4.4.29)第一个方程，左边的非线性对流项为零，即

$$\mu \frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}y^2} = P \tag{4.4.32}$$

因此

$$u(y) = \frac{U}{2h}(y+h) + \frac{P}{2\mu}(y^2 - h^2) \tag{4.4.33}$$

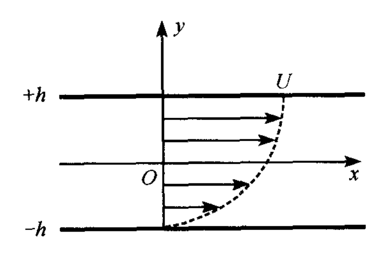


图 4.4.2 板间的速度

板间流速分布如图 4.4.2. 上下板受到的摩擦力为

$$\tau_y = \left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y}\right)\Bigg|_{y=\pm h} = \frac{\mu U}{2h} \pm hP \tag{4.4.34}$$

当 $U=0$ 时，上下板受到的剪应力大小相等方向相反. 必须说明：本例是可以严格求解的少数例子之一，恰好非线性对流项为零.

4. **黏滞不可压缩流体的湍流和边界层：**当 Reynolds 数增加时，惯性力大于黏滞力，流体从层流过渡到湍流. 以圆管中黏滞流体的流动为例，Reynolds 数为 $Re=\rho Ud/\mu$，其中 U 是管流的平均速度，d 是圆管的直径. 实验表明，圆管中流体的流动状态取决于 Reynolds 数的大小，随着 Reynolds 数的增加，管内流体流动从层流过渡到湍流，而且临界值 Re_c 与外界条件有关(如圆管入口处的形状)，但有一个下界 $Re_c=2000$. 当 $Re<2000$ 时，无论外界的扰动多大，管内流动保持稳定的层流状态.

当 Reynolds 数很大时，ν 很小，似乎可以忽略式(4.4.26)中的黏滞项简化成无黏滞、不可压缩流体的运动方程

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{v} \approx \boldsymbol{f} - \frac{1}{\rho}\nabla p \tag{4.4.35}$$

其实不然. 前面我们已经讨论了黏滞、不可压缩流体运动的有旋性，而无黏滞、不可压缩流体是可以作无旋运动的. 问题出在边界上：在流体体内，当 Reynolds 数很大时，黏滞力可忽略不计，流体的流动满足上式；而在边界上，黏滞流体粘着在固体上，法向速度和切向速度为零(不能忽略黏滞！). 由于切向黏滞力为 $\mu\partial u/\partial y$(其中 y 为边界法向距离)，而 μ 很小，必定 $\partial u/\partial y$ 很大. 故在边界附近，流动变化极大，而且一般是有旋的.

因此在高 Reynolds 数时,流体的运动分两个性质很不相同的区域:①流体体内,可看作无黏滞流体;②边界附近区域(称为**边界层**),必须考虑流体的黏滞,边界层的厚度大约为 $\delta \sim L/\sqrt{Re}$.

关于湍流和边界层的数学理论不作进一步的讨论.

习　题　4

4.1　流体运动的速度场为

$$v_x = yzt, \quad v_y = zxt, \quad v_z = 0$$

(1) 求加速度场;(2) 当 $t=10$ 时,求点(2,5,3)处质元的加速度.(提示:$\boldsymbol{a}=\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v}$)

答案:$a_x=1815, a_y=4506, a_z=0$

4.2　流体在平面上做定常流动,其速度场用极坐标表示为 $\boldsymbol{v}(r,\varphi)=br\boldsymbol{e}_\varphi$,其中 b 为常量.求加速度场.(提示:用直角坐标)

答案:$\boldsymbol{a}=-b^2r\boldsymbol{e}_r$

4.3　判断流动

$$v_x = -\frac{2xyz}{(x^2+y^2)^2}, \quad v_y = -\frac{(x^2-y^2)z}{(x^2+y^2)^2}, \quad v_z = -\frac{y}{x^2+y^2}$$

(1) 是否定常? (2) 是否无旋? 如果无旋,求速度势;(3) 是否可压缩流体?(提示:求$\nabla\times\boldsymbol{v}$ 和$\nabla\cdot\boldsymbol{v}$.积分线取$(0,0,0)\to(x,0,0)\to(x,y,0)\to(x,y,z)$)

答案:(1) 定常;(2) 无旋,$\varphi(x,y,z)=\frac{yz}{x^2+y^2}$;(3) 不可压缩.

4.4　设单位质量的不可压缩流体受到的压力为

$$f_x=(y^2+z^2)/2+2\lambda(y+z)x$$
$$f_y=(x^2+z^2)/2+2\mu(x+z)y$$
$$f_z=(x^2+y^2)/2+2\nu(x+y)z$$

其中 λ,μ 和 ν 为常量.求流体达到平衡时 λ,μ 和 ν 的值.(提示:流体平衡方程为 $\rho\boldsymbol{f}=\nabla p$,对不可压缩流体 $\boldsymbol{f}=\nabla(p/\rho)$,故要求$\nabla\times\boldsymbol{f}=0$(梯度的旋度为零))

答案:λ,μ 和 ν 都为 1/2.

4.5　设流体中的应力张量为

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix} 3xy & 5y^2 & 0 \\ 5y^2 & 0 & 2z \\ 0 & 2z & 0 \end{bmatrix}$$

流体平衡时 $-\rho\boldsymbol{f}=\nabla\cdot\boldsymbol{P}$,求体力 $\boldsymbol{f}$.

4.6 密度为 ρ 的不可压缩流体运动速度势 $\varphi(x,y)=a(x^2-y^2)$，a 为常量. 若静止处压强为 p_0，求压强分布(忽略重力). (提示：$\dfrac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v}=\boldsymbol{f}-\dfrac{1}{\rho}\nabla p$ 速度与时间无关，并且体力密度为零)

答案：$p=p_0-2\rho a^2(x^2+y^2)$.

4.7 流体沿截面积不变的直管流动，流速为

$$v=\frac{1}{2}(v_1+v_2)+\frac{1}{2}(v_1-v_2)\tanh(x)$$

其中 v_1 和 v_2 为常量. 在 $x\to-\infty$，密度 $\rho=\rho_1$. (1) 此流体是否可压缩？(2) 如果可压缩，求沿管道的密度分布. (提示：(1) 一维情况判断流体是否可压缩，计算 $\partial v/\partial x$ 即可；(2) 由连续性方程，在定常流动条件下 $\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{v})=0$；当 $x\to-\infty$，$v\to v_1$)

答案：$\rho=\rho_1 v_1/v$.

4.8 一个半径为 R 的球在不可压缩、无黏性理想流体中作速度为 $\boldsymbol{U}$ 的匀速运动. (1) 以球为参考系，求流体流过球表面任何点的速度 $\boldsymbol{v}$；(2) 求球表面处的压强分布；(3) 求保持球做匀速运动必须的力. (提示：(1) 求速度势；(2) 伯努利方程(忽略重力)：$\rho v^2/2+p=\rho v_0^2/2+p_0$；(3) 流体作用于球(运动方向)的合力 $F=\int p(R,\vartheta)\cos\vartheta \mathrm{d}S$)

答案：(1) $\boldsymbol{v}(R,\vartheta)=(3/2)U\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta$；(2) $p(R,\vartheta)=p_0+(\rho U^2/2)(1-9\sin^2\vartheta/4)$；(3) $F=0$. 因为球做无摩擦的匀速运动.

4.9 密度为 ρ 的不可压缩流体做定常流动，流场的速度分布为

$$\boldsymbol{v}=\begin{cases} r\omega\boldsymbol{e}_\varphi, & 0\leqslant r\leqslant r_0 \\ \dfrac{r_0^2\omega}{r}\boldsymbol{e}_\varphi, & r\geqslant r_0 \end{cases}$$

其中 ω 为常量，设 $r\to\infty$ 时，压强为 $p=p_0$(忽略重力). 求此流场的压强分布. (提示：(1) 当 $0\leqslant r\leqslant r_0$ 时，由速度分布，流体以角速度 ω 作转动，因此在以角速度 ω 作转动的非惯性参考系内流体处于平衡状态，即 $\rho\boldsymbol{f}=\nabla p$，其中 $\boldsymbol{f}=\rho\omega^2 r\boldsymbol{e}_r$ 为惯性力密度；(2) 在 $r\geqslant r_0$ 区域，用 $\dfrac{1}{2}\rho v^2+p=$常量)

答案：$$p(r)=\begin{cases} p_0-\rho r_0^2\omega^2+\dfrac{1}{2}\rho r^2\omega^2, & 0\leqslant r\leqslant r_0 \\ p_0-\dfrac{1}{2}\dfrac{\rho r_0^4\omega^2}{r^2}, & r\geqslant r_0 \end{cases}.$$

4.10 假定组成天体的流体物质的状态方程为

$$p=\frac{1}{2}k\rho^2$$

其中 k 为常量. (1) 证明对于这种物质，在流体平衡的条件下，密度与引力势之间

存在线性关系；(2) 在流体平衡条件下，求密度分布满足的方程；(3) 假定平衡时天体是球对称的，求天体的半径.（提示：(1) 流体平衡条件：$\rho \boldsymbol{f}=\nabla p$，其中 $\boldsymbol{f}$ 由引力产生，即 $\boldsymbol{f}=-\nabla U$；(2) 引力势满足 Poisson 方程，$\nabla^2 U=4\pi G\rho$(G 为万有引力常量)；(3) 求密度方程，边界条件是天体的边缘处 $\rho=0$，内部 $\rho>0$，然后求引力 $\boldsymbol{f}=-\nabla U$，球对称条件要求在天体的中心($r=0$)，引力为零）

第 5 章 Lagrange 力学

我们讨论了质点、质点组、刚体、弹性体和流体的力学问题，它们都是以牛顿力学为基础，以系统受的力和加速度为基本量，来描述系统的运动. 牛顿力学存在两个基本问题：①系统受的力包括施加到系统的主动力和约束反力(见第 1 章)，而约束力又与运动相关，通常要得到约束力的明显表达式是困难的，甚至是不可能的. 牛顿力学并没有给出处理该问题的有效方法；②牛顿力学概括了自然界中的力学现象，而不能推广到研究非力学现象(如电磁场). 而自然界中一切物理现象(包括力学和非力学现象)都有内在的联系，牛顿力学无法建立这种联系. 本章和下一章介绍的分析力学从系统能量的角度来研究它的动力学行为，同时又扩大了坐标的概念，因而可以运用到非力学系统中去.

5.1 虚功原理、d'Alembert 原理和约束反力

首先介绍分析力学中的几个概念.

自由度：力学系统的独立坐标个数叫做力学系统**在有限运动中的自由度**；力学系统的独立速度分量的个数叫做力学系统**在无限小运动中的自由度**. 一般如果不指明，“自由度”三字表示“无限小运动中的自由度”.

约束：设力学系统由 n 个质点组成，在自由空间中系统有 $3n$ 个自由度，但当系统受到某种约束时，自由度相应减少. 如刚体内任意两点间的距离不变就是一种约束，因此刚体只有 6 个自由度. 约束按不同的标准，可分各种类型.

1. 几何约束：对力学系统的几何形状加以限制，数学表达式为

$$f_\sigma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n;t)=0 \quad (\sigma=1,2,\cdots,k) \tag{5.1.1}$$

因为在 $3n$ 个坐标中，有 k 个坐标可用其余的$(3n-k)$个坐标表示出来. 故独立坐标的数目就减少 k 个，即为$(3n-k)$. 在几何约束中，独立坐标的数目与系统的自由度相同. 几何约束称为**完整约束**.

2. 运动约束：不仅对力学系统的几何形状加以限制，还涉及到力学系统的运动情况，数学表达式为

$$f_\sigma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n;\dot{\boldsymbol{r}}_1,\dot{\boldsymbol{r}}_2,\cdots,\dot{\boldsymbol{r}}_n;t)=0 \quad (\sigma=1,2,\cdots,k) \tag{5.1.2}$$

如果对时间的导数可积分出来，化成式(5.1.1)的形式，那么这种运动约束等于是几何约束，因此也是完整约束. 但如果对时间的导数不能积分出来，则称为**非完整约束**. 这时不可能从上式中解出用其余的$(3n-k)$个坐标表示的 k 个坐标. 故非完

整约束并不能减少独立坐标的个数，即并不降低有限运动的自由度. 但是可从方程(5.1.2)中解出 k 个速度分量，也就是说，可以降低无限小运动的自由度. 在实际物理问题中，很少遇到非完整约束问题，故以后不讨论.

3. 稳定约束和不稳定约束：**稳定约束**就是方程(5.1.1)与时间 t 无关；反之，称为**不稳定约束**.

4. 不可解约束和可解约束：例如当质点的运动限制在某一曲面上时，约束方程就是曲面的方程 $f(x_1,x_2,x_3)=0$. 但是如果质点可以在曲面上，也可以在某个方向离开曲面，约束方程变成不等式 $f(x_1,x_2,x_3)\leqslant 0$，这种约束称为**可解约束**，而不能离开曲面的情况称为**不可解约束**. 总之，用不等式表示的约束为可解约束，反之为不可解约束. 可解约束也是一种非完整约束.

凡只受到完整约束的力学系统称为**完整系**，下面我们只讨论这种情况.

广义坐标：假定力学系统有 k 个完整约束，那么有 $s\equiv(3n-k)$ 个独立坐标. 在牛顿力学中，这 s 个独立坐标是从质点的位置矢量中选择的. 但在分析力学中，我们不限制于这种选择，而是任取 s 个独立的变量 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$，那么 $3n$ 个位置矢量就可表示成

$$\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r}_i(q_1,q_2,\cdots,q_s,t)\quad(i=1,2,\cdots,n)\tag{5.1.3}$$

称 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$ 为 **Lagrange 广义坐标**. 它们可以是长度、面积、体积、角度等其他的一切物理量.

实位移和虚位移：如果质点的位置矢量为 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}(t)$，在无限短时间 $\mathrm{d}t$ 内，质点的位移为 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\dot{\boldsymbol{r}}\mathrm{d}t$，当 $\mathrm{d}t=0$ 时，位移也为零. 这种由于时间的变化而产生的位移称为**实位移**，并以 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 表示. 现在让我们想像在某一时刻(注意：在同一时刻)质点在约束所许可的情况下，发生了一个无限小的变更，这个变更不是由于质点的运动而实际发生的，只是想像中可能发生的位移，它只决定于质点在同一时刻的位置和约束，而不是由于时间的改变所引起的，这种位移称为**虚位移**，并用 $\delta\boldsymbol{r}$ 表示. 由于时间没有改变，故 $\delta t=0$. 质点的虚位移有无限多个. 在稳定约束下，实位移是虚位移中的一个，而在不稳定约束下，实位移与虚位移不一致. 考虑质点约束在曲面 $f(x_1,x_2,x_3,t)=0$ 上的运动：质点的虚位移为 $\delta\boldsymbol{r}=\delta x_1\boldsymbol{e}_1+\delta x_2\boldsymbol{e}_2+\delta x_3\boldsymbol{e}_3$，而虚位移也满足约束，即 $\boldsymbol{r}+\delta\boldsymbol{r}$ 也必须在曲面上

$$f(x_1+\delta x_1,x_2+\delta x_2,x_3+\delta x_3,t)=0\tag{5.1.4a}$$

即

$$\delta f=\frac{\partial f}{\partial x_1}\delta x_1+\frac{\partial f}{\partial x_2}\delta x_2+\frac{\partial f}{\partial x_3}\delta x_3=0\tag{5.1.4b}$$

(5.1.4b)式即为 $\nabla f\cdot\delta\boldsymbol{r}=0$，因此虚位移一定在曲面的切向. 当约束为不稳定约束时，曲面也在变化，而实位移随曲面的变化而变化. 因此二者不可能一致.

理想约束：作用在质点上的力(包括主动力和约束反力)在任意虚位移 $\delta\boldsymbol{r}$ 中所

作的功叫**虚功**. 如果作用在力学体系上所有的约束反力 $\boldsymbol{R}_i(i=1,2,\cdots,n)$ 在任意虚位移 $\delta\boldsymbol{r}$ 中所作虚功之和为零

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{R}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0 \tag{5.1.5}$$

则这种约束称为**理想约束**. 对曲面约束,上式是不难理解的,因为虚位移在曲面的切向,上式意味着约束反力与切向垂直,即约束反力在法向. 故只有光滑的曲面才有可能是理想约束. 引入虚位移的目的就是要利用上式消去约束反力. 在分析力学中主要目的是分析系统的运动,而不是求约束反力.

虚功原理:设系统的约束为 k 个,第 i 个质点上的主动力合力为 F_i,约束反力合力为 R_i. 如果这个力学系统处于平衡状态,那么每个质点都处于平衡状态,于是

$$\boldsymbol{F}_i+\boldsymbol{R}_i=0\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{5.1.6}$$

现在假定每个质点自它的平衡位置发生一虚位移 $\delta\boldsymbol{r}_i$,上式两边点乘 $\delta\boldsymbol{r}_i$

$$\boldsymbol{F}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{R}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{5.1.7}$$

对所有的 i 求和

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i+\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{R}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0 \tag{5.1.8}$$

考虑理想约束且利用式(5.1.5)得到

$$\delta W\equiv\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0 \tag{5.1.9}$$

因此力学系统的平衡条件为虚功为零 $\delta W=0$,反过来可以证明,对任意的 $\delta\boldsymbol{r}_i$,如果 $\delta W=0$ 成立,那么力学系统必处于平衡状态. 这一结论称为**虚功原理**.

因为存在 k 个约束条件,不是所有的 $\delta\boldsymbol{r}_i$ 独立. 利用 $s=(3n-k)$ 个独立的广义坐标 $(q_1,q_2,\cdots,q_s)$

$$\delta\boldsymbol{r}_i=\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha \tag{5.1.10}$$

代入方程(5.1.9)

$$\begin{aligned}\delta W&\equiv\sum_{i=1}^{n}\left[\boldsymbol{F}_i\cdot\left(\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\right)\right]=\sum_{\alpha=1}^{s}\left[\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha\right]\\&\equiv\sum_{\alpha=1}^{s}Q_\alpha\delta q_\alpha=0\end{aligned} \tag{5.1.11}$$

因为 δq_α 是独立变分,上式给出

$$Q_\alpha=0\quad(\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{5.1.12}$$

Q_α 称为**广义力**,显然它不包含约束反力

$$Q_\alpha=\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\right)\quad(\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{5.1.13}$$

如果所有的力为保守力

$$\boldsymbol{F}_i = -\nabla_i U(\boldsymbol{r}_i) \tag{5.1.14}$$

用广义坐标表示$U(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)=U(q_1,q_2,\cdots,q_s)$，于是

$$Q_\alpha = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{3}F_j^{(i)}\frac{\partial x_j^{(i)}}{\partial q_\alpha}\right) = -\sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial U}{\partial x_j^{(i)}}\frac{\partial x_j^{(i)}}{\partial q_\alpha}\right) = -\frac{\partial U}{\partial q_\alpha} \tag{5.1.15}$$

其中$\boldsymbol{r}_i=(x_1^{(i)},x_2^{(i)},x_3^{(i)})$为第$i$个质点的位置矢量，故方程(5.1.12)变成

$$\frac{\partial U}{\partial q_\alpha} = 0 \tag{5.1.16}$$

即系统平衡时，势能达到极值. 当极值是极小时，平衡是稳定的；而当极值是极大时，平衡不稳定. 故稳定平衡的条件可以写为$\Delta U>0$，即

$$\delta U = 0;\quad \delta^2 U > 0 \tag{5.1.17}$$

d'Alembert 原理：虚功原理是对静力学问题的，对动力学问题，根据牛顿第二定律，力学系统的第i个质点的运动方程为$\boldsymbol{F}_i+\boldsymbol{R}_i=m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i$，把该式右边的惯性力移到左边得到

$$\boldsymbol{F}_i + \boldsymbol{R}_i - m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i = 0 \tag{5.1.18}$$

上式与静平衡方程(5.1.6)相似. 因此动力学问题形式上转化为静平衡问题. 利用虚功原理可以得到：在理想约束作用下，主动力和惯性力的虚功之和为零，即

$$\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{F}_i - m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i)\cdot\delta\boldsymbol{r}_i = 0 \tag{5.1.19}$$

(5.1.19)式称为 **d'Alembert 原理**. 同虚功原理一样，d'Alembert 原理的优点在于不包含约束反力.

约束反力：虚功原理和 d'Alembert 原理的优点在于不包含约束反力，但问题往往要求约束反力，如何解决？我们介绍 Lagrange 乘子法.

首先以三维直角坐标为例，由虚功原理方程(5.1.9)得到

$$\delta W = \sum_{i=1}^{n}(F_{ix}\delta x_i + F_{iy}\delta y_i + F_{iz}\delta z_i) = 0 \tag{5.1.20}$$

由于存在k个约束条件，不是所有的虚位移$\delta\boldsymbol{r}_i=(\delta x_i,\delta y_i,\delta z_i)(i=1,2,\cdots,n)$都独立，由$k$个约束条件方程(5.1.1)得到微分形式(注意：虚位移在同时发生，故$\delta t=0$)

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f_\sigma}{\partial x_i}\delta x_i + \frac{\partial f_\sigma}{\partial y_i}\delta y_i + \frac{\partial f_\sigma}{\partial z_i}\delta z_i\right) = 0 \tag{5.1.21}$$

其中$\sigma=1,2,\cdots,k$. 上式乘以 Lagrange 乘子λ_σ并相加，然后再与方程(5.1.20)相加得到

$$\sum_{i=1}^{n}\left[\left(F_{ix}+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial x_i}\right)\delta x_i + \left(F_{iy}+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial y_i}\right)\delta y_i + \left(F_{iz}+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial z_i}\right)\delta z_i\right] = 0 \tag{5.1.22}$$

选择λ_σ，使k个不独立虚位移前的乘数等于零，余下的$(3n-k)$个虚位移是独立变

量，而独立虚位移前的乘数也必须等于零. 于是可以得到 $3n$ 个方程

$$F_{ix}+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial x_i}=0;\quad F_{iy}+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial y_i}=0$$
$$F_{iz}+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial z_i}=0 \tag{5.1.23}$$

其中 $i=1,2,\cdots,n$，结合 k 个约束方程，就可以得到系统平衡时的 $3n$ 坐标和 k 个 Lagrange 乘子. 因系统平衡时，每个质点受到的主动力与约束反力之和为零，故上式第二项表示约束反力，即

$$\boldsymbol{R}_i=\left(\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial x_i},\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial y_i},\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial z_i}\right) \tag{5.1.24}$$

其中 $i=1,2,\cdots,n$.

其次考虑广义坐标. 在广义坐标的选取时，我们已考虑到了存在 k 个完整约束，故只选择 $s=(3n-k)$ 个独立的广义坐标，现在为了求约束反力，先不考虑约束条件，选择 ν 个广义坐标 $(q_1,q_2,\cdots,q_\nu)$，显然 $\nu>s$ 且 ν 个广义坐标中只有 $s=(3n-k)$ 个是独立的. 由虚功原理方程(5.1.11)得到

$$\delta W=\sum_{\alpha=1}^{\nu}Q_\alpha\delta q_\alpha=0 \tag{5.1.25}$$

注意：现在 ν 个广义坐标不独立，不能得到式(5.1.12). 用 ν 个广义坐标表示的约束方程以及微分形式为

$$f_\sigma(q_1,q_2,\cdots,q_\nu,t)=0;\quad \sum_{\alpha=1}^{\nu}\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha=0 \tag{5.1.26}$$

其中 $\sigma=1,2,\cdots,k$. 上式第二个方程乘以 Lagrange 乘子 λ_σ 并相加，然后再与方程(5.1.25)相加得到

$$\delta W=\sum_{\alpha=1}^{\nu}\left(Q_\alpha+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha=0 \tag{5.1.27}$$

同样选择 λ_σ，使 $(\nu-s)$ 个不独立虚广义位移前的乘数等于零，而余下的 $s=(3n-k)$ 个虚广义位移是独立变量，前面的乘数必须等于零. 于是可以得到 ν 个方程

$$Q_\alpha+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}=0\quad(\alpha=1,2,\cdots,\nu) \tag{5.1.28}$$

以上 ν 个方程结合 k 个约束方程就可以决定系统平衡时 ν 个广义坐标 $(q_1,q_2,\cdots,q_\nu)$ 和 k 个 Lagrange 乘子 λ_σ. 显然广义约束反力 R_α 为

$$R_\alpha=\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}\quad(\alpha=1,2,\cdots,\nu) \tag{5.1.29}$$

如果选择广义坐标就是三维直角坐标 $\nu=3n$，则立即可得到方程(5.1.24)，不过现在约束反力是以标量形式表示而已. 必须说明的是：①如果用虚功原理来求约束反力，它并不比牛顿力学简单；②Lagrange 乘子法也可以讨论存在非完整约束的

问题.

5.2　Lagrange 方程和动力学问题中的约束反力

利用广义坐标，方程(5.1.19)中虚位移由式(5.1.10)表示，可得

$$\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{F}_i - m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i)\cdot\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha = 0 \tag{5.2.1}$$

即

$$-\sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s}m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha + \sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha}^{s}\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha = 0 \tag{5.2.2}$$

第一、二项交换求和顺序

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s}m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{s}\left[\sum_{i=1}^{n}\left(m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\right)\right] \equiv \sum_{\alpha=1}^{s}P_\alpha\delta q_\alpha \tag{5.2.3a}$$

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s}\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{s}\left[\sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\right)\right] = \sum_{\alpha=1}^{s}Q_\alpha\delta q_\alpha \tag{5.2.3b}$$

其中

$$\begin{aligned}P_\alpha &= \sum_{i=1}^{n}\left(m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\right)\\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{i=1}^{n}m_i\left(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\right) - \sum_{i=1}^{n}m_i\left(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\right)\end{aligned} \tag{5.2.4}$$

而

$$\dot{\boldsymbol{r}}_i = \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\frac{\partial q_\alpha}{\partial t} \tag{5.2.5a}$$

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_\beta} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\beta}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\frac{\partial q_\alpha}{\partial t}\right) = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\beta}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta\right) = \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta} \tag{5.2.5b}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha} &= \sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial^2 \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta\partial q_\alpha}\dot{q}_\beta\right) + \frac{\partial^2 \boldsymbol{r}_i}{\partial t\partial q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_\alpha}\left[\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta\right) + \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t}\right]\\ &= \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right)\end{aligned} \tag{5.2.5c}$$

上式和式(5.2.5b)代入(5.2.4)得到

$$P_\alpha = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{i=1}^{n}m_i\left(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \sum_{i=1}^{n}m_i\left(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_\alpha}\right) \tag{5.2.6}$$

注意到系统的动能为

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i^2 \tag{5.2.7}$$

式(5.2.6)可改写成

$$P_\alpha = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} \tag{5.2.8}$$

于是，由方程(5.2.3a)、(5.2.3b)和上式，动力学方程(5.2.2)变成

$$\sum_{\alpha=1}^{s}\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) + \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} + Q_\alpha\right]\delta q_\alpha = 0 \tag{5.2.9}$$

对于只有完整约束的力学体系，δq_α 是独立变分，故上式变成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\right) - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = Q_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, s) \tag{5.2.10}$$

这就是基本形式的 **Lagrange 方程**，它们是广义坐标以时间 t 作为自变量的 s 个二阶常微分方程.

Lagrange 方程的优点：只要知道系统用广义坐标作为变量的动能表达式和广义力(用广义坐标和时间表示)，就能求出系统的运动方程. $\dot{q}_\alpha$ 和 $p_\alpha \equiv \partial T/\partial \dot{q}_\alpha$ 分别称为**广义速度和广义动量**，Q_α 称为**广义力**，而 $L_\alpha \equiv \partial T/\partial q_\alpha$ 称为 **Lagrange 力**. 因此 Lagrange 方程(5.2.10)意味着：**广义动量的时间变化率等于广义力与 Lagrange 力之和**. 注意：广义力中仅包含主动力.

为了分析广义动量和广义力的物理意义，假定某一广义坐标 q_σ 描述系统的整体平动，其平动方向沿单位矢量 $\boldsymbol{n}$(如图 5.2.1)，则

$$\boldsymbol{r}_i(q_\sigma + \mathrm{d}q_\sigma) - \boldsymbol{r}_i(q_\sigma) = \boldsymbol{n}\mathrm{d}q_\sigma \tag{5.2.11a}$$

即

$$\boldsymbol{n} = \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma} \tag{5.2.11b}$$

图 5.2.1　q_σ 表示整体平动

相应的广义动量为

$$p_\sigma = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\sigma} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\sigma} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\sigma}\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i\right)$$
$$= \sum_{i=1}^{n} m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_\sigma} = \sum_{i=1}^{n} m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma} = \boldsymbol{n}\cdot\sum_{i=1}^{n} m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i \tag{5.2.12}$$

得到(5.2.12)式已利用了式(5.2.5b). 上式右边是系统总动量在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影. 因此对应于描述平动的广义坐标，相应的广义动量为系统总动量在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影. 相应的广义力分量为

$$Q_\sigma = \sum_{i=1}^{n}\left(\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma}\right) = \boldsymbol{n}\cdot\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i \tag{5.2.13}$$

显然 Q_σ 为主动力之和在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影. 如果 q_σ 反映系统的整体转动，如图 5.2.2，则

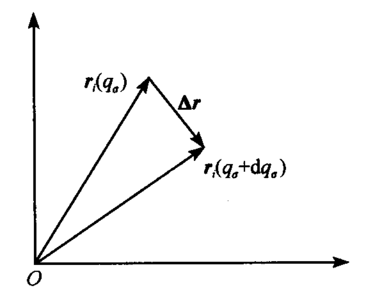


图 5.2.2　q_σ 表示整体转动

$$\boldsymbol{r}_i(q_\sigma+\mathrm{d}q_\sigma)-\boldsymbol{r}_i(q_\sigma)=\Delta\boldsymbol{r}=\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{r}_i\mathrm{d}q_\sigma \tag{5.2.14a}$$

其中 $\boldsymbol{e}$ 为转动轴方向的单位矢量，即

$$\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{r}_i=\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma} \tag{5.2.14b}$$

相应的广义动量为

$$\begin{aligned}p_\sigma&=\frac{\partial T}{\partial\dot{q}_\sigma}=\frac{\partial}{\partial\dot{q}_\sigma}\left(\sum_{i=1}^n\frac{1}{2}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i\right)=\sum_{i=1}^n m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma}\\&=\sum_{i=1}^n m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot(\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{r}_i)=\boldsymbol{e}\cdot\sum_{i=1}^n m_i\boldsymbol{r}_i\times\dot{\boldsymbol{r}}_i=\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{J}\end{aligned} \tag{5.2.15}$$

(5.2.15)式右边是系统总动量矩在 $\boldsymbol{e}$ 方向的投影. 因此对应于描述转动的广义坐标，相应的广义动量为系统总动量矩在 $\boldsymbol{e}$ 方向的投影. 相应的广义力分量为

$$Q_\sigma=\sum_{i=1}^n\left(\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma}\right)=\boldsymbol{e}\cdot\sum_{i=1}^n(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{F}_i) \tag{5.2.16}$$

显然 Q_σ 为主动力产生力矩之和在 $\boldsymbol{e}$ 方向的投影.

一般如果根据定义式(5.1.13)求广义力反而不方便. 由

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^n\boldsymbol{F}_i\cdot\delta\boldsymbol{r}_i&=\sum_{i=1}^n\boldsymbol{F}_i\cdot\sum_{\alpha=1}^s\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\\&=\sum_{\alpha=1}^s\left(\sum_{i=1}^n\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha=\sum_{\alpha=1}^s Q_\alpha\delta q_\alpha\end{aligned} \tag{5.2.17}$$

求 Q_σ 时，令 $\delta q_\alpha=0(\alpha\neq\sigma)$，求出这时主动力做的虚功，除以 δq_σ 即可得到 Q_σ. 注意：对动力学问题，上式左边不为零.

例 5.2.1 平面极坐标中质点的运动方程.

解： 质点有两个自由度，取广义坐标为 r 和 φ，令 $q_1=r, q_2=\varphi$，动能表达式为

$$T=\frac{1}{2}m(v_r^2+v_\varphi^2)=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\varphi}^2) \tag{5.2.18}$$

因此广义动量为

$$p_r=\frac{\partial T}{\partial\dot{r}}=m\dot{r};\quad p_\varphi=\frac{\partial T}{\partial\dot{\varphi}}=mr^2\dot{\varphi} \tag{5.2.19}$$

显然它们分别是质点的径向动量以及质点相对于原点的动量矩. 而虚功为

$$\delta W=\boldsymbol{F}\cdot\delta\boldsymbol{r}=F_r\delta r+F_\varphi r\delta\varphi=Q_r\delta r+Q_\varphi\delta\varphi \tag{5.2.20}$$

故广义力为

$$Q_r=F_r;\quad Q_\varphi=rF_\varphi \tag{5.2.21}$$

或者根据广义力的定义

$$\begin{aligned}Q_r&=\boldsymbol{F}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial r}=\boldsymbol{F}\cdot\frac{\partial(r\boldsymbol{e}_r)}{\partial r}=\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{e}_r=F_r\\Q_\varphi&=\boldsymbol{F}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial\varphi}=\boldsymbol{F}\cdot\frac{\partial(r\boldsymbol{e}_r)}{\partial\varphi}=r\boldsymbol{F}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{e}_r}{\partial\varphi}=r\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{e}_\varphi=rF_\varphi\end{aligned} \tag{5.2.22}$$

与式(5.2.20)得到的结果相同. 由 Lagrange 方程(5.2.10)容易得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{r}) - mr\dot{\varphi}^2 = F_r; \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mr^2\dot{\varphi}) = rF_\varphi \tag{5.2.23}$$

即

$$m(\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) = F_r; \quad m(r\ddot{\varphi} + 2\dot{r}\dot{\varphi}) = F_\varphi \tag{5.2.24}$$

与方程(1.1.9)完全相同. 而在牛顿力学中,需要求加速度矢量,比用 Lagrange 方程要复杂多了.

例 5.2.2 非惯性参考系中的运动方程.

解: 用牛顿方程必须求出质点的绝对加速度,这是非常麻烦的. 而用 Lagrange 方程只要知道质点的绝对速度就可以了. 设非惯性参考系 S 相对于惯性参考系 S' 以恒定角速度 $\boldsymbol{\omega}$ 绕 z 轴(与 z' 轴重合)旋转,求质点在非惯性参考系 S 中的运动方程. 由 1.4 节的式(1.4.12),质点的绝对速度为

$$\boldsymbol{v}' = (\dot{x} - \omega y)\boldsymbol{e}_x + (\dot{y} + \omega x)\boldsymbol{e}_y + \dot{z}\boldsymbol{e}_z \tag{5.2.25}$$

上式增加了 z 方向的速度分量. 因而质点相对于惯性参考系 S' 的动能为

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m[(\dot{x} - \omega y)^2 + (\dot{y} + \omega x)^2 + \dot{z}^2] \tag{5.2.26}$$

而虚功为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F} \cdot \delta\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{F} \cdot \delta\boldsymbol{r} &= Q_1\delta x + Q_2\delta y + Q_3\delta z \\ &= F_x\delta x + F_y\delta y + F_z\delta z \end{aligned} \tag{5.2.27}$$

广义力即为 $\boldsymbol{F}$ 在非惯性参考系 S 中的三个分量. 于是由 Lagrange 方程(5.2.10)得到质点在非惯性参考系 S 中的运动方程为

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= F_x + 2m\omega\dot{y} + m\omega^2 x \\ m\ddot{y} &= F_y - 2m\omega\dot{x} + m\omega^2 y \\ m\ddot{z} &= F_z \end{aligned} \tag{5.2.28}$$

上式显然与方程(1.4.15)是一致的(只要令 $\dot{\boldsymbol{\omega}}=0$).

约束反力: 最后简单介绍如何求动力学问题中的约束反力. 同平衡问题类似,为了求约束反力,先不考虑约束条件,选择 ν 个广义坐标 $(q_1, q_2, \cdots, q_\nu)$,显然 $\nu > s$ 且 ν 个广义坐标中只有 $s=(3n-k)$ 个是独立的. 由方程(5.2.9)得到

$$\sum_{\alpha=1}^{\nu}\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} + \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} + Q_\alpha\right]\delta q_\alpha = 0 \tag{5.2.29}$$

注意: 现在 ν 个广义坐标不独立,不能得到简单的 Lagrange 方程. 用 ν 个广义坐标表示的约束方程以及微分形式为

$$f_\sigma(q_1, q_2, \cdots, q_\nu, t) = 0; \quad \sum_{\alpha=1}^{\nu}\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha = 0 \tag{5.2.30}$$

其中 $\sigma=1,2,\cdots,k$. 上式第二个方程乘以 Lagrange 乘子 λ_σ 并相加，然后再与方程(5.2.29)相加得到

$$\sum_{\alpha=1}^{\nu}\Big[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial\dot{q}_\alpha}+\frac{\partial T}{\partial q_\alpha}+Q_\alpha+\sum_{\sigma}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}\Big]\delta q_\alpha=0 \tag{5.2.31}$$

同样选择 λ_σ 使 $(\nu-s)$ 个不独立虚广义位移前的乘数等于零，而余下的 $s=(3n-k)$ 个虚广义位移是独立变量，前面的乘数必须等于零，于是可以得到 ν 个方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big(\frac{\partial T}{\partial\dot{q}_\alpha}\Big)-\frac{\partial T}{\partial q_\alpha}=Q_\alpha+\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha} \tag{5.2.32}$$

其中 $\alpha=1,2,\cdots,\nu$. 以上 ν 个方程结合 k 个约束方程就可以决定系统 ν 个广义坐标 $(q_1,q_2,\cdots,q_\nu)$ 和 k 个 Lagrange 乘子 λ_σ. 显然广义约束反力 R_α 为

$$R_\alpha=\sum_{\sigma=1}^{k}\lambda_\sigma\frac{\partial f_\sigma}{\partial q_\alpha}\quad(\alpha=1,2,\cdots,\nu) \tag{5.2.33}$$

注意：式(5.1.29)中 Lagrange 乘子 λ_σ 与时间无关，而上式中 λ_σ 是时间的函数. 同样必须说明的两点是：①如果用 Lagrange 方程来求约束反力，它并不比牛顿力学简单；②Lagrange 乘子法也可以讨论存在非完整约束的问题.

5.3 保守力体系的 Lagrange 方程和广义能量守恒

如果所有的主动力为保守力，把方程(5.1.15)代入方程(5.2.10)得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial\dot{q}_\alpha}-\frac{\partial(T-U)}{\partial q_\alpha}=0\quad(\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{5.3.1}$$

因为 U 仅是 q_α 的函数，令 $L=T-U$，上式变成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_\alpha}-\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}=0\quad(\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{5.3.2}$$

上式称为**保守力系的 Lagrange 方程**，或者 Lagrange 方程，L 称为 **Lagrange 函数**，为系统的动能与势能之差，它是系统的一个特征函数. 注意 Lagrange 函数不是唯一的，我们在下章说明这一点.

例 5.3.1 质量为 m 的质点受到势能为 $U(r)$ 的作用力，求质点在一个绕 z 轴以角速度 ω 转动的球坐标系中的 Lagrange 函数.

解： 在静止参考系中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}'&=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}=\dot{r}\boldsymbol{e}_r+r\dot{\vartheta}\boldsymbol{e}_\vartheta+r\sin\vartheta\dot{\varphi}\,\boldsymbol{e}_\varphi+\boldsymbol{\omega}\times(r\boldsymbol{e}_r)\\ \boldsymbol{\omega}&=\omega\boldsymbol{e}_z=\omega(\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r-\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta)\end{aligned} \tag{5.3.3}$$

因此质点的速度为

$$\boldsymbol{v}'=\dot{r}\boldsymbol{e}_r+r\dot{\vartheta}\boldsymbol{e}_\vartheta+(r\sin\vartheta\dot{\varphi}+\omega r\sin\vartheta)\boldsymbol{e}_\varphi \tag{5.3.4}$$

动能为

$$T = \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{v}' = \frac{1}{2}m[\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + (r\sin\vartheta\dot{\varphi} + \omega r\sin\vartheta)^2] \tag{5.3.5}$$

Lagrange 函数为

$$\begin{aligned} L = T - U &= \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2\sin^2\vartheta\dot{\varphi}^2) - U(r) \\ &+ \frac{1}{2}m(\omega^2 r^2\sin^2\vartheta + 2\omega r^2\sin^2\vartheta\dot{\varphi}) \end{aligned} \tag{5.3.6}$$

求得了 Lagrange 函数,容易得到运动方程.

下面我们介绍由方程(5.3.2)推出的两个重要结论.

1. **循环坐标和广义动量守恒**:如果 Lagrange 函数不显含某个坐标 q_σ,那么称 q_σ 为循环坐标. 方程(5.3.2)变成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\sigma} \equiv \frac{\mathrm{d}p_\sigma}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{5.3.7}$$

其中 $p_\sigma = \partial L/\partial \dot{q}_\sigma$ 为广义动量,因此相应坐标的广义动量守恒.

2. **能量和广义能量守恒**:如果 Lagrange 函数不显含时间,那么 Lagrange 函数的时间变化率为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial L}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)\dot{q}_\alpha \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\dot{q}_\alpha\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_{\alpha=1}^{s}p_\alpha\dot{q}_\alpha\right) \end{aligned} \tag{5.3.8}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\sum_{\alpha=1}^{s}p_\alpha\dot{q}_\alpha - L\right) \equiv \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{5.3.9}$$

其中

$$h = \sum_{\alpha=1}^{s}p_\alpha\dot{q}_\alpha - L \tag{5.3.10}$$

称为**广义能量函数**. 因此当 Lagrange 函数不显含时间时,系统的广义能量函数守恒.

下面看 h 的意义. 如果 Lagrange 函数不显含时间,那么一般变换式(5.1.3)也不显含时间:$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_i(q_1, q_2, \cdots, q_s)(i = 1, 2, \cdots, n)$,于是

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}m_i\left(\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha\right)\cdot\left(\sum_{\beta=1}^{s}\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta\right) \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s}\sum_{\beta=1}^{s}\frac{1}{2}m_i\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\dot{q}_\alpha\dot{q}_\beta \end{aligned} \tag{5.3.11}$$

这是广义速度的二次齐次多项式. 因为

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\gamma} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{1}{2}m_i\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\gamma}\dot{q}_\alpha + \sum_{i=1}^{n}\sum_{\beta=1}^{s}\frac{1}{2}m_i\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\gamma}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s} m_i \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\gamma}\dot{q}_\alpha \tag{5.3.12}$$

于是

$$\sum_{\gamma=1}^{s} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\gamma}\dot{q}_\gamma = \sum_{\gamma=1}^{s}\sum_{i=1}^{n}\sum_{\alpha=1}^{s} m_i \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\gamma}\dot{q}_\alpha \dot{q}_\gamma = 2T \tag{5.3.13}$$

代入方程(5.3.10)

$$h = \sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \dot{q}_\alpha - L = 2T - (T - U) = T + U \equiv E \tag{5.3.14}$$

因此在满足三个条件下:①主动力为保守力;②Lagrange 函数不显含时间;③空间坐标用广义坐标表达时不显含时间.广义能量函数是系统的机械能.广义能量函数守恒就是系统的机械能守恒.

特别要指出的是:只有当系统的动能是广义速度的二次齐次函数,才有上述结论.如果 T 不仅包括广义速度二次项,还有一次项和常数项

$$T = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{s}\sum_{\beta=1}^{s} a_{\alpha\beta}\dot{q}_\alpha \dot{q}_\beta + \sum_{\alpha=1}^{s} b_\alpha \dot{q}_\alpha + c \equiv T_2 + T_1 + T_0 \tag{5.3.15}$$

式(5.3.13)变成

$$\sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}\dot{q}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial T_2}{\partial \dot{q}_\alpha}\dot{q}_\alpha + \frac{\partial T_1}{\partial \dot{q}_\alpha}\dot{q}_\alpha + \frac{\partial T_0}{\partial \dot{q}_\alpha}\dot{q}_\alpha\right) = 2T_2 + T_1 \tag{5.3.16}$$

代入方程(5.3.10)得到

$$h = 2T_2 + T_1 - [(T_2 + T_1 + T_0) - U] = T_2 - T_0 + U \tag{5.3.17}$$

显然 $T_2 - T_0$ 并不代表动能.因此即使主动力都是保守力,Lagrange 方程也不能给出能量积分,除非约束是稳定的.在非稳定约束情况下,约束反力可以做功,能量不守恒,而 Lagrange 方程不包含约束反力,故只能得到广义能量函数积分.

例 5.3.2 主动力为非保守力的例子.考虑带电量 q,质量为 m 的粒子,在外电场 $\boldsymbol{E}$、磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的运动.

解: 粒子受到的作用力为(见第7章讨论)

$$\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \tag{5.3.18}$$

一般电场和磁场是时间的函数,因此 F 不能用一个保守势来描述,Lagrange 函数不能简单地写成动能减去势能的形式.可以证明如果 Lagrange 函数取形式

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 - q(\Phi - \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{A}) \tag{5.3.19}$$

则保守力系的 Lagrange 方程能给出正确的运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{\boldsymbol{r}}) = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \tag{5.3.20}$$

式(5.3.19)中 Φ 和 $\boldsymbol{A}$ 为标量势和矢量势(见第10章讨论)

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}; \quad \boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} \tag{5.3.21}$$

证明:把式(5.3.19)代入 Lagrange 方程(5.3.2)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{x}_i + qA_i) = -q\frac{\partial \Phi}{\partial x_i} + q\frac{\partial}{\partial x_i}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \quad (i=1,2,3) \tag{5.3.22}$$

或者写成矢量形式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A}) = -q\nabla\Phi + q\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{5.3.23}$$

可见粒子的动量为

$$\boldsymbol{P} = m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A} \tag{5.3.24}$$

称为**正则动量**,它包括了带电粒子与外场的相互作用(见例 7.4.1).利用关系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A}$$

$$\nabla(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A}) + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} = \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{A} \tag{5.3.25}$$

由方程(5.3.23)得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\boldsymbol{v}) = -q\nabla\Phi - q\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + q(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}) = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}) \tag{5.3.26}$$

上式与方程(5.3.20)完全一样.值得注意的是:$q(\Phi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A})$不能理解为带电粒子的势能,即使电场和磁场是静态场,也只能把 $q\Phi$ 理解为电势能,而不能把 $q\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}$ 看成"磁势",因为磁场的作用力 $q(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$垂直于粒子的速度矢量而不做功.方程(5.3.19)的推导将在 11.4 节给出.

例 5.3.3 对称重刚体的定点运动.

解: 刚体重心在对称轴上而与定点 O 不重合,在主轴坐标中刚体的动能为

$$T = \frac{1}{2}I_1\omega_1^2 + \frac{1}{2}I_2\omega_2^2 + \frac{1}{2}I_3\omega_3^2 \tag{5.3.27}$$

重力势能为 $U = mgh\cos\vartheta$,采用 Euler 角表示,由方程(2.1.13)得到(注意:$I_1 = I_2$)

$$T = \frac{1}{2}I_1(\dot{\vartheta}^2 + \dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta) + \frac{1}{2}I_3(\dot{\psi} + \dot{\varphi}\cos\vartheta)^2 \tag{5.3.28}$$

于是 Lagrange 函数为

$$L = T - U = \frac{1}{2}I_1(\dot{\vartheta}^2 + \dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta) + \frac{1}{2}I_3(\dot{\psi} + \dot{\varphi}\cos\vartheta)^2 - mgh\cos\vartheta \tag{5.3.29}$$

显然 L 不包括 φ 和 ψ,它们为循环坐标,相应的广义动量守恒,即

$$\begin{aligned} p_\varphi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = (I_1\sin^2\vartheta + I_3\cos^2\vartheta)\dot{\varphi} + I_3\dot{\psi}\cos\vartheta = C_1 \\ p_\psi &= \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = I_3(\dot{\psi} + \dot{\varphi}\cos\vartheta) = C_2 \end{aligned} \tag{5.3.30}$$

其中 C_1 和 C_2 为常数.因为 φ 和 ψ 为角度,故广义动量 p_ψ 和 p_φ 为角动量或动量矩.由 φ 和 ψ 的定义,p_φ 和 p_ψ 分别是刚体相对于空间坐标系 z'轴的动量矩和相对

于对称轴的动量矩. 又 Lagrange 函数不显含时间且 T 是广义速度的二次齐次函数,机械能守恒,即

$$\frac{1}{2}I_1(\dot{\vartheta}^2+\dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta)+\frac{1}{2}I_3(\dot{\psi}+\dot{\varphi}\cos\vartheta)^2+mgh\cos\vartheta=E \tag{5.3.31}$$

因此,由 Lagrange 方程,我们很容易就得到了重刚体定点运动的三个运动积分,而 2.4 节中有关讨论是比较麻烦的.

5.4　多自由度力学系统的微振动

设一个完整、稳定且保守的力学系统在平衡位置时的广义坐标 $q_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,s)$均为零(如果不为零,只要通过恰当的线性变换就可以变为零). 如果力学系统自平衡位置发生微小偏移,那么该力学体系的运动情况如何呢? 把力学系统的势能在平衡位置展开,可得到

$$U=U_0+\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial U}{\partial q_\alpha}\right)_0 q_\alpha+\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\sigma=1}^{s}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_\alpha\partial q_\sigma}\right)_0 q_\alpha q_\sigma+\cdots \tag{5.4.1}$$

在平衡位置,由方程(5.1.16)并令 $U_0=0$ 得到

$$U\approx\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\sigma=1}^{s}c_{\alpha\sigma}q_\alpha q_\sigma \tag{5.4.2}$$

式中

$$c_{\alpha\sigma}=\left(\frac{\partial^2 U}{\partial q_\alpha\partial q_\sigma}\right)_0 \tag{5.4.3}$$

为常数且在平衡点取值. 由式(5.3.11),动能可以写成

$$T=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{s}\sum_{\sigma=1}^{s}\left(\sum_{i=1}^{n}m_i\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\sigma}\right)\dot{q}_\alpha\dot{q}_\sigma\equiv\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{s}\sum_{\sigma=1}^{s}a_{\alpha\sigma}\dot{q}_\alpha\dot{q}_\sigma \tag{5.4.4}$$

把上式中的系数也在平衡位置作展开

$$a_{\alpha\sigma}=(a_{\alpha\sigma})_0+\sum_{\gamma=1}^{s}\left(\frac{\partial a_{\alpha\sigma}}{\partial q_\gamma}\right)_0 q_\gamma+\cdots \tag{5.4.5}$$

只保留第一项,取 $a_{\alpha\sigma}\approx(a_{\alpha\sigma})_0$. $c_{\alpha\sigma}$和 $a_{\alpha\sigma}$分别称为**准弹性系数**和**惯性系数**. 于是代入 Lagrange 方程(5.3.2)得到体系在平衡位置附近的动力学方程为

$$\sum_{\sigma=1}^{s}(a_{\alpha\sigma}\ddot{q}_\sigma+c_{\alpha\sigma}q_\sigma)=0\quad(\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{5.4.6}$$

令 $q_\sigma=d_\sigma\exp(\lambda t)(\sigma=1,2,\cdots,s)$代入上式

$$\sum_{\sigma=1}^{s}d_\sigma(a_{\alpha\sigma}\lambda^2+c_{\alpha\sigma})=0\quad(\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{5.4.7}$$

上式存在非零解的条件为系数行列式等于零

$$\det(a_{\alpha\sigma}\lambda^2+c_{\alpha\sigma})=0 \tag{5.4.8}$$

可以解出 $2s$ 个本征值 $\lambda_l(l=1,2,\cdots,2s)$，将每一个 λ_l 代入方程(5.4.7)，可得到一组解 $d_\sigma^{(l)}(\sigma=1,2,\cdots,s)$（注意：$s$ 个系数 $d_\sigma^{(l)}$ 中只有一个是独立的，如取为 $d_0^{(l)}$，那么其他 $(s-1)$ 个系数可用 $d_0^{(l)}$ 表示），于是方程(5.4.6)的通解为

$$q_\sigma = \sum_{l=1}^{2s} d_\sigma^{(l)} \exp(\lambda_l t) \quad (\sigma = 1,2,\cdots,s) \tag{5.4.9}$$

为了保证运动是平衡位置附近的小振动，要求 λ_l 都是虚数，也就是要求平衡位置是 U 的极小点. 令 $\lambda_l=\pm \mathrm{i}\omega_l$，上式可写成

$$q_\sigma(t) = \sum_{l=1}^{2s} [d_\sigma^{(l)} \exp(\mathrm{i}\omega_l t) + d'^{(l)}_\sigma \exp(-\mathrm{i}\omega_l t)] \tag{5.4.10}$$

其中 $\sigma=1,2,\cdots,s$，ω_l 称为系统的**简正角频率**或**本征角频率**.

因为动能 T 总大于零，而我们已假定平衡位置的势能为零，偏离平衡位置时，势能一定大于零，因此动能表达式(5.4.4)和势能表达式(5.4.1)都是正定的二次式，故总存在线性变换

$$q_\alpha = \sum_{l=1}^{s} g_{\alpha l}\xi_l \quad (\alpha = 1,2,\cdots,s) \tag{5.4.11}$$

使动能和势能变成正则的形式

$$T = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{s} a_l^0 \dot{\xi}_l^2, \quad U = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{s} c_l^0 \xi_l^2 \tag{5.4.12}$$

其中 ξ_l 称为**简正坐标**. 于是，动力学方程简化为

$$a_l^0 \ddot{\xi}_l + c_l^0 \xi_l = 0 \quad (l = 1,2,\cdots,s) \tag{5.4.13}$$

上式的解容易得到为

$$\xi_l = a_l \cos(\omega_l t) + b_l \sin(\omega_l t) \quad (l = 1,2,\cdots,s) \tag{5.4.14}$$

其中 $\omega_l=\sqrt{c_l^0/a_l^0}$，即为简正角频率.

例 5.4.1 三原子分子的振动.

解： 考虑线性三原子对称分子（如 CO_2）的振动，其中两个原子相同（称为 A 原子），中间一个为 B 原子. 平衡时三个原子在一直线上（假定为 x 轴）. 分别考虑纵向（x 方向）和横向（y 方向）振动.

1. 横向振动：三个原子沿 y 轴方向作横向振动，系统有三个自由度，但是一个自由度对应于分子在 y 方向的整体平动，我们不考虑整体平动而假定质心是静止的，即

$$m_A y_1 + m_B y_2 + m_A y_3 = 0 \tag{5.4.15}$$

另外还有一个自由度对应于分子的整体转动，我们不考虑整体转动而认为分子对于质心的动量矩为零，即

$$m_A \dot{y}_1 l - m_A \dot{y}_3 l = 0 \tag{5.4.16}$$

因此三原子对称分子的横向振动只有一个自由度，不妨选为 y_1. 由(5.4.15)式和(5.4.16)式，可以得到系统的动能为

$$T = \frac{1}{2}m_A\dot{y}_1^2 + \frac{1}{2}m_B\dot{y}_2^2 + \frac{1}{2}m_A\dot{y}_3^2 = \frac{m_A}{m_B}(2m_A + m_B)\dot{y}_1^2 \tag{5.4.17}$$

在微振动下，系统的势能为 $U(y_1)=k_t y_1^2/2$，其中 k_t 表示作横向振动时的等效劲度系数. 于是系统的 Lagrange 函数为

$$L = T - U = \frac{m_A}{m_B}(2m_A + m_B)\dot{y}_1^2 - \frac{1}{2}k_t y_1^2 \tag{5.4.18}$$

相应的振动方程为

$$\ddot{y}_1 + \frac{k_t m_B}{2m_A(2m_A + m_B)}y_1 = 0 \tag{5.4.19}$$

故振动角频率为

$$\omega_t = \sqrt{\frac{k_t m_B}{2m_A(2m_A + m_B)}} \tag{5.4.20}$$

2. 纵向振动：三个原子沿 x 方向作纵振动，系统有三个自由度，但一个自由度对应于分子在 x 方向的整体平动，质心是静止的，即

$$m_A x_1 + m_B x_2 + m_A x_3 = 0 \tag{5.4.21}$$

故只须考虑两个振动自由度，取广义坐标为 x_1 和 x_3，利用上式，系统的动能为

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}m_A\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m_B\dot{x}_2^2 + \frac{1}{2}m_A\dot{x}_3^2 \\ &= \frac{1}{2}\frac{m_A}{m_B}(m_A + m_B)(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m_A^2}{m_B}\dot{x}_1\dot{x}_3 \end{aligned} \tag{5.4.22}$$

系统的弹性势能为

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2}k_l(x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{2}k_l(x_3 - x_2)^2 \\ &= \frac{1}{2}\frac{k_l}{m_B^2}[(m_A + m_B)^2 + m_A^2](x_1^2 + x_3^2) \\ &\quad + 2\frac{k_l m_A}{m_B^2}(m_A + m_B)x_1x_3 \end{aligned} \tag{5.4.23}$$

其中 k_l 表示作纵向振动时的等效劲度系数. 故 Lagrange 函数为

$$\begin{aligned} L = T - U &= \frac{1}{2}\frac{m_A}{m_B}(m_A + m_B)(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_3^2) + \frac{m_A^2}{m_B}\dot{x}_1\dot{x}_3 \\ &\quad - \frac{1}{2}\frac{k_l}{m_B^2}[(m_A + m_B)^2 + m_A^2](x_1^2 + x_3^2) + 2\frac{k_l m_A}{m_B^2}(m_A + m_B)x_1x_3 \end{aligned} \tag{5.4.24}$$

于是由 Lagrange 方程得到运动方程

$$\begin{aligned} &m_A m_B(m_A + m_B)\ddot{x}_1 + m_A^2 m_B\ddot{x}_3 + k_l[(m_A + m_B)^2 + m_A^2]x_1 \\ &\quad + 2k_l m_A(m_A + m_B)x_3 = 0 \\ &m_A^2 m_B\ddot{x}_1 + m_A m_B(m_A + m_B)\ddot{x}_3 + 2k_l m_A(m_A + m_B)x_1 \\ &\quad + k_l[(m_A + m_B)^2 + m_A^2]x_3 = 0 \end{aligned} \tag{5.4.25}$$

令 $x_1=A_1\exp(\lambda t)$，$x_3=A_3\exp(\lambda t)$代入(5.4.24)式和(5.4.25)式得到

$$\begin{aligned}&\{m_A m_B(m_A+m_B)\lambda^2+k_1[(m_A+m_B)^2+m_A^2]\}A_1\\&\quad+[m_A^2 m_B\lambda^2+2k_1 m_A(m_A+m_B)]A_3=0\\&[m_A^2 m_B\lambda^2+2k_1 m_A(m_A+m_B)]A_1\\&\quad+\{m_A m_B(m_A+m_B)\lambda^2+k_1[(m_A+m_B)^2+m_A^2]\}A_3=0\end{aligned}\tag{5.4.26}$$

由方程的系数行列式为零得到

$$\begin{aligned}&\{m_A m_B(m_A+m_B)\lambda^2+k_1[(m_A+m_B)^2+m_A^2]\}^2\\&=[m_A^2 m_B\lambda^2+2k_1 m_A(m_A+m_B)]^2\end{aligned}\tag{5.4.27}$$

故得到 λ^2 的二个解为

$$\lambda_1^2=-k_1\frac{2m_A+m_B}{m_A m_B};\quad \lambda_3^2=-k_1\frac{1}{m_A}\tag{5.4.28}$$

因此二个简正振动角频率为

$$\omega_1=\sqrt{\frac{k_1(2m_A+m_B)}{m_A m_B}};\quad \omega_3=\sqrt{\frac{k_1}{m_A}}\tag{5.4.29}$$

由 λ_1^2 代入式(5.4.26)得 $A_1=A_3$，而把 λ_3^2 代入式(5.4.26)得 $A_1=-A_3$，因此方程(5.4.25)的一般解为

$$\begin{aligned}x_1&=\sum_{\beta=1,3}[A_\beta^+\exp(\mathrm{i}\omega_\beta t)+A_\beta^-\exp(-\mathrm{i}\omega_\beta t)]\\x_3&=\sum_{\beta=1,3}[A_\beta^+\exp(\mathrm{i}\omega_\beta t)-A_\beta^-\exp(-\mathrm{i}\omega_\beta t)]\end{aligned}\tag{5.4.30}$$

另一方面，可以直接对 Lagrange 函数对角化，令

$$x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1+\xi_3);\quad x_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi_1-\xi_3)\tag{5.4.31}$$

代入式(5.4.24)得

$$\begin{aligned}L=&\frac{1}{2}\left[\frac{m_A}{m_B}(2m_A+m_B)\dot{\xi}_1^2-\frac{k_1}{m_B^2}(2m_A+m_B)^2\xi_1^2\right]\\&+\frac{1}{2}(m_A\dot{\xi}_3^2-k\xi_3^2)\end{aligned}\tag{5.4.32}$$

容易得到简正坐标的解

$$\begin{aligned}\xi_1&=B_1^+\exp(\mathrm{i}\omega_1 t)+B_1^-\exp(-\mathrm{i}\omega_1 t)\\\xi_3&=B_3^+\exp(\mathrm{i}\omega_3 t)+B_2^-\exp(-\mathrm{i}\omega_3 t)\end{aligned}\tag{5.4.33}$$

由 $\xi_1=(x_1+x_3)/\sqrt{2}$；$\xi_3=(x_1-x_3)/\sqrt{2}$，当 $\xi_3=0$ 时，ξ_1 作简谐振动，而 $\xi_3=0$ 意味着两个 A 原子同相振动；如果 $\xi_1=0$，ξ_3 作简谐振动，而 $\xi_1=0$ 意味两个 A 原子反相振动.

5.5 经典力学中的对称性和守恒定律

从前面各章的讨论中，我们导出了一定条件下的守恒定律，即能量守恒、动量守恒和动量矩守恒. 事实上，守恒定律的产生有深刻的物理原因，其根源在于时间和空间的均匀性，其意义包括四个方面：①自然规律不因时间不同而异，即“时间的均匀性”. 一个物理系统（本章为力学系统，可推广到非力学系统），如果不受外场作用，或者外场不随时间变化，以不同的时刻作为计算时间的起点，对于研究运动是等效的；②自然规律在空间各处都相同，不因地点而异，即“空间的均匀性”. 一个物理系统，如果不受外场作用，或者外场空间均匀且不随时间变化，无论选择空间哪一点作为坐标原点，研究系统的运动都是等效的；③自然规律的旋转不变性，即“空间各向同性”. 一个物理系统，如果不受外场作用，无论选择空间哪一个方向作为坐标轴的方向，研究系统的运动都是等效的. 注意：如果存在外场，就破坏了空间的各向同性；④自然规律对于每一个惯性参考系是完全相同的，即 Lorentz 变换的不变性. 最后一方面将在第 11 章中讨论.

1. 时间均匀性与能量守恒：时间均匀性也称为时间平移对称性，其意义是：如果时间平移 δt，系统的 Lagrange 函数应该保持不变，即 $\delta L=0$. 从 Lagrange 函数的时间平移不变性能得到什么呢？ 显然

$$\delta L = L(\boldsymbol{r}_\alpha, \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha, t+\delta t) - L(\boldsymbol{r}_\alpha, \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha, t) = \frac{\partial L}{\partial t}\delta t = 0 \tag{5.5.1}$$

注意：为了明确，直接选用空间位置矢量作为广义坐标. 因此 Lagrange 函数的时间平移不变性要求 $\partial L/\partial t=0$，即 Lagrange 函数不显含时间，故系统的广义能量守恒. 当系统仅受到保守场作用时，广义能量就是系统的机械能（动能与势能之和）. 可见，能量守恒与系统的时间平移对称性联系. 当然如果外场随时间变化，时间的起点必须指定，这就破坏了时间平移不变性要求. 可见，能量守恒是由时间平移对称性产生的.

2. 空间的均匀性与动量守恒：空间均匀性也称为空间平移对称性，其意义是：如果空间平移 $\delta\boldsymbol{r}_\alpha\equiv\boldsymbol{\varepsilon}$，系统的 Lagrange 函数应该保持不变，即 $\delta L=0$. 从 Lagrange 函数的空间平移不变性能得到什么呢？ 显然

$$\begin{aligned}\delta L &= L(\boldsymbol{r}_\alpha+\delta\boldsymbol{r}_\alpha, \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha+\delta\dot{\boldsymbol{r}}_\alpha, t) - L(\boldsymbol{r}_\alpha, \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha, t)\\ &= \sum_\alpha\left(\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}+\frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha}\cdot\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}\right)=\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\sum_\alpha\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_\alpha}=0\end{aligned} \tag{5.5.2}$$

注意：$\boldsymbol{\varepsilon}$ 是常矢量（与时间无关），在空间平移中广义速度应不变. 由矢量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的任意性，Lagrange 函数的空间平移不变性要求

$$\sum_\alpha\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_\alpha}=0 \tag{5.5.3}$$

利用 Lagrange 方程得到

$$\sum_{\alpha} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\alpha} \boldsymbol{p}_{\alpha} \equiv \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{5.5.4}$$

即 $\boldsymbol{P}$=常矢量，系统的总动量守恒. 可见，动量守恒是由空间的平移对称性产生的. 如果系统只在某个方向具有平移对称性，如 x 方向，则 $\delta \boldsymbol{r}_{\alpha} \equiv \varepsilon \boldsymbol{e}_x$，式(5.5.2)简化为

$$\begin{aligned} \delta L &= L(\boldsymbol{r}_{\alpha} + \delta \boldsymbol{r}_{\alpha}, \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha} + \delta \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}, t) - L(\boldsymbol{r}_{\alpha}, \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}, t) \\ &= \varepsilon \boldsymbol{e}_x \cdot \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} = 0 \end{aligned} \tag{5.5.5}$$

由 ε 的任意性得到

$$\boldsymbol{e}_x \cdot \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} = 0, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{e}_x \cdot \boldsymbol{P}) = 0 \tag{5.5.6}$$

故 x 方向的动量守恒.

3. 空间的各向同性与角动量守恒：空间各向同性也称为空间旋转对称性，其意义是：如果空间旋转 $\delta \boldsymbol{r}_{\alpha} = \delta \boldsymbol{\vartheta} \times \boldsymbol{r}_{\alpha}$，系统的 Lagrange 函数应该保持不变，即 $\delta L = 0$. 从 Lagrange 函数的空间旋转不变性能得到什么呢？显然

$$\begin{aligned} \delta L &= L(\boldsymbol{r}_{\alpha} + \delta \boldsymbol{r}_{\alpha}, \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha} + \delta \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}, t) - L(\boldsymbol{r}_{\alpha}, \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}, t) \\ &= \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_{\alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} \cdot \delta \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha} \right) \\ &= \sum_{\alpha} \left[\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} \cdot (\delta \boldsymbol{\vartheta} \times \boldsymbol{r}_{\alpha}) + \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} \cdot (\delta \boldsymbol{\vartheta} \times \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}) \right] \\ &= \delta \boldsymbol{\vartheta} \cdot \sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}_{\alpha} \times \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} + \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha} \times \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} \right) = 0 \end{aligned} \tag{5.5.7}$$

由 $\delta \boldsymbol{\vartheta}$ 的任意性，Lagrange 函数的空间旋转不变性要求

$$\sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}_{\alpha} \times \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} + \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha} \times \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} \right) = 0 \tag{5.5.8}$$

利用 Lagrange 方程，上式化成

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}_{\alpha} \times \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} + \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\alpha}}{\mathrm{d}t} \times \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} \right) &= \sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}_{\alpha} \times \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{p}_{\alpha} + \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{\alpha}}{\mathrm{d}t} \times \boldsymbol{p}_{\alpha} \right) \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\alpha} (\boldsymbol{r}_{\alpha} \times \boldsymbol{p}_{\alpha}) = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t} = 0 \end{aligned} \tag{5.5.9}$$

即 $\boldsymbol{J}$=常矢量，系统的动量矩守恒. 可见，动量矩守恒是由空间的旋转对称性产生的. 如果系统只有在绕某个转动轴转动时才具有转动对称性，如 z 轴方向，则 $\delta \boldsymbol{\vartheta} \equiv \varepsilon \boldsymbol{e}_z$，式(5.5.7)简化为

$$\delta L = \varepsilon \boldsymbol{e}_z \cdot \sum_{\alpha} \left(\boldsymbol{r}_{\alpha} \times \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_{\alpha}} + \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha} \times \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_{\alpha}} \right) = 0 \tag{5.5.10}$$

由 ε 的任意性，

$$\boldsymbol{e}_z \cdot \sum_{\alpha}\left(\boldsymbol{r}_\alpha \times \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{r}_\alpha} + \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha \times \frac{\partial L}{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_\alpha}\right) = 0 \tag{5.5.11}$$

于是式(5.5.9)变成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_{\alpha}\boldsymbol{e}_z \cdot (\boldsymbol{r}_\alpha \times \boldsymbol{p}_\alpha) = \frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{J})}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{5.5.12}$$

故 z 方向的动量矩守恒.

习 题 5

5.1 一质点重量为 W，被约束在铅直圆周 $x^2+y^2=a^2$ 上，并且受到一个水平斥力 k^2x 的作用，其中 a 和 k 为常量. (1) 求平衡位置；(2) 用 Lagrange 乘子法求约束反作用力的大小.

答案：平衡位置有四个：(1) $x=0, y=\pm a, R=\mp W$；(2) $y=W/k^2, x=\pm\sqrt{a^2-W^2/k^4}, R=-k^2a$

5.2 质点一维运动的 Lagrange 函数为

$$L=\left(\frac{1}{2}m\dot{q}^2-\frac{1}{2}kq^2\right)\exp(\gamma t)$$

其中 m、k 和 γ 均为大于零的常量. (1) 求 Lagrange 运动方程；(2) 描述运动情况；(3) 如果采用广义坐标 $s=q\exp(\gamma t/2)$，求 Lagrange 函数、运动方程，和运动积分；(4) 比较用 q 和 s 描述质点运动的区别.

答案：(1) $m\ddot{q}+m\gamma\dot{q}+kq=0$；(2) $\gamma/2<\sqrt{k/m}$，质点作弱阻尼振动；$\gamma/2>\sqrt{k/m}$，质点作过阻尼振动；$\gamma/2=\sqrt{k/m}$，临界阻尼；(3) 新的 Lagrange 函数和运动方程分别为

$$L=\frac{1}{2}m\left(\dot{s}-\frac{1}{2}\gamma s\right)^2-\frac{1}{2}ks^2,\quad \ddot{s}+\left(\frac{k}{m}-\frac{\gamma^2}{4}\right)s=0$$

运动积分

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{s}}\dot{s}-L=\text{常量}$$

(4) 当 $\gamma/2<\sqrt{k/m}$，质点分别作弱阻尼振动和简谐振动.

5.3 一个质量为 m 的珠子在一个半径为 a 的旋转圆环上无摩擦地滑动，圆环绕通过铅直直径作恒定角速度 ω 的转动. (1) 写出系统的 Lagrange 函数并求运动积分；(2) 求平衡位置并且讨论其稳定性；(3) 求稳定平衡点附近的小振动角频率 Ω. (提示：设珠子所在直径与最低点所在直径的夹角为 ϑ，由例 5.3.1，Lagrange

函数为 $L=\frac{1}{2}ma^2\dot{\vartheta}^2+mga\cos\theta+\frac{1}{2}m\omega^2a^2\sin^2\vartheta$

运动积分为能量积分. 等效势能为 $U=-mga\cos\theta-\frac{1}{2}m\omega^2a^2\sin^2\vartheta$)

答案:(2) 当 $g/(a\omega^2)>1$ 时,平衡点为 $\vartheta=0$(稳定)和 $\vartheta=\pi$(不稳定);当 $g/(a\omega^2)<1$ 时,平衡点为 $\vartheta=0$(不稳定)、$\vartheta=\pi$(不稳定)和 $\vartheta=\arccos[g/(\omega^2a)]$(稳定);(3) $\Omega=\sqrt{(g-a\omega^2)/a}$;$\Omega=\sqrt{\omega^2-g^2/(a^2\omega^2)}$.

5.4　一个质量为 m 的质点在一个光滑的抛物面

$$x^2+y^2=a(a-z)$$

的顶点从静止开始下滑,选柱坐标 ρ,φ,z 为广义坐标,(1) 写出含 Lagrange 乘子的 Lagrange 方程;(2) 求约束力;(3) 质点何时离开抛物面?(提示:约束方程 $f=\rho^2-a(a-z)=0$,Lagrange 函数 $L=\frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2+\rho^2\dot{\varphi}^2+\dot{z}^2)-mgz$)

答案:(1) $m(\ddot{\rho}-\rho\dot{\varphi}^2)=2\lambda\rho$;$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\rho^2\dot{\varphi})=0$;$m\ddot{z}=-mg+a\lambda$;

(2) 约束反力

$$R_\rho=\frac{2ma^3g\rho}{(4\rho^2+a^2)^2};\quad R_\varphi=0;\quad R_z=\frac{ma^4g\rho}{(4\rho^2+a^2)^2};$$

(3) $\boldsymbol{R}$ 不可能为零,故不会离开抛物面. 注意:由运动方程和初始条件,$\dot{\varphi}=0$.

5.5　一个粒子在抛物面

$$z=\frac{1}{2}b(x^2+y^2)$$

(其中 b 为常量)内壁作无摩擦运动. (1) 如果粒子在高度 $z=z_0$ 处的圆轨道中运动,求质量为 m 粒子的能量和对 z 轴的角动量;(2) 对在水平圆轨道上运动的粒子有一个小微扰,求粒子围绕原来轨道作小振动的角频率. (提示:Lagrange 函数

$$L=\frac{1}{2}m(\dot{\rho}^2+\rho^2\dot{\varphi}^2+\dot{z}^2)-mgz;\quad z=\frac{1}{2}b\rho^2$$

圆周运动条件:$\dot{\rho}=\ddot{\rho}=0$)

答案:(1) $E=T+V=\frac{1}{2}m\rho_0^2\dot{\varphi}_0^2+mgz_0=2mgz_0$;$J=m\rho_0^2\dot{\varphi}_0=2mz_0\sqrt{\frac{g}{b}}$;(2) $\omega=\sqrt{\frac{4bg}{1+2bz_0}}$,注意利用:$\frac{\partial L}{\partial\varphi}=0$,$\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}=m\rho^2\dot{\varphi}=c$($c$ 为常量).

5.6　质量为 m 的粒子在铅直平面内的光滑抛物线 $z=x^2/a$(a 为常量)上运动. (1) 写出 Lagrange 函数;(2) 求平衡位置小振动的角频率.

答案:(1) $L=\frac{1}{2}m\left(1+\frac{4x^2}{a^2}\right)\dot{x}^2-\frac{1}{a}mgx^2$;平衡点:$x=0,\omega=\sqrt{\frac{2g}{a}}$.

5.7 质量为 m 的粒子在二维势场中运动

$$U(x,y)=-\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}\alpha x^2y^2+\frac{1}{4}\beta x^4$$

求平衡点并讨论其稳定性,其中 k、α 和 β 为大于零的常量.

答案:三组平衡点

$$\begin{cases}x_{10}=\sqrt{k/\beta}\\ y_{10}=0\end{cases};\quad \begin{cases}x_{20}=-\sqrt{k/\beta}\\ y_{20}=0\end{cases};\quad \begin{cases}x_{30}=0\\ y_{30}=c\end{cases}$$

其中 c 为常量. 前两组为稳定平衡点;第三组由常数 c 决定:当 $c>\sqrt{k/\alpha}$ 或 $c<-\sqrt{k/\alpha}$ 时,平衡点 $(0,c)$ 是稳定的;当 $-\sqrt{k/\alpha}<c<\sqrt{k/\alpha}$ 时,平衡点 $(0,c)$ 是不稳定的.

5.8 质量为 m、长度为 l 的两相同单摆用劲度系数 k 的轻弹簧连起来,弹簧的自然长度等于两悬点间距 a. 求此系统围绕平衡位置做小振动的简正角频率和振动模式;无限多个这样的单摆,两两弹簧耦合,求此系统的振动模式和相应的简正角频率. (提示:系统的 Lagrange 函数

$$L=\frac{1}{2}ml^2\dot{\vartheta}_1^2+\frac{1}{2}ml^2\dot{\vartheta}_2^2-\frac{1}{2}mgl\dot{\vartheta}_1^2-\frac{1}{2}mgl\dot{\vartheta}_2^2-\frac{1}{2}kl^2(\vartheta_1-\vartheta_2)^2$$

当存在无限多个偶合单摆时,系统的 Lagrange 函数为

$$L=\frac{1}{2}ml^2(\dot{\vartheta}_1^2+\dot{\vartheta}_2^2+\cdots)-\frac{1}{2}mgl(\vartheta_1^2+\vartheta_2^2+\cdots)$$
$$-\frac{1}{2}kl^2[(\vartheta_2-\vartheta_1)^2+(\vartheta_3-\vartheta_2)^2+\cdots]$$

因单摆和弹簧组成空间的周期函数,设 ϑ_n 的空间和时间周期解为

$$\vartheta_n=A\exp[\mathrm{i}(kna-\omega t)])$$

答案:$\omega_1=\sqrt{\frac{g}{l}}$; $\omega_2=\sqrt{\frac{g}{l}+\frac{2k}{m}}$; $\omega_n=\sqrt{\frac{g}{l}+\frac{2k_n}{m}(1-\cos k_na)}$,

$k_n=2\pi/\lambda_n$, $\lambda_n=na$.

5.9 一个系统的动能和势能为

$$T=\frac{1}{2}(\dot{q}_1^2+\dot{q}_2^2+\dot{q}_3^2);\quad U=2q_1^2+\frac{5}{2}q_2^2+2q_3^2-q_1q_2-q_2q_3$$

开始时 $q_1=q_{10},q_2=q_{20},q_3=q_{30},\dot{q}_1=\dot{q}_2=\dot{q}_3=0$,求系统的振动.

答案:$\omega_1=\sqrt{3},\omega_2=2,\omega_3=\sqrt{6}$,简正模式振幅比为

对 ω_1:$\frac{q_2}{q_1}=\frac{q_3}{q_1}=1$; 对 ω_2:$\frac{q_2}{q_1}=0$; $\frac{q_3}{q_1}=-1$; 对 ω_3:$\frac{q_2}{q_1}=-2$; $\frac{q_3}{q_1}=1$.

然后写出通解.

5.10 证明对于冲击运动，Lagrange 运动方程为

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)_{t_2} - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)_{t_1} = S_\alpha \quad (\alpha = 1,2,\cdots,s)$$

其中 S_α 是广义力的冲量

$$S_\alpha = \int_{t_1}^{t_2} Q_\alpha \mathrm{d}t$$

（提示：对 Lagrange 方程两边从 t_1 到 t_2 积分）

第 6 章　Hamilton 力学

Lagrange 函数用广义坐标和广义速度作为独立变量，因此 Lagrange 动力学方程与牛顿运动方程一样，是关于时间变量的 s 个二阶微分方程. 而 Hamilton 力学用广义坐标和广义动量作为独立变量，导出了 $2s$ 个一阶微分方程，在某些场合可以给问题的解决带来方便. 但从 Lagrange 力学到 Hamilton 力学，并不是为了简单的方便. 确切地说，Hamilton 力学的优越性在于提供了一个在许多物理学领域内作理论推广的框架，特别是研究各种非力学问题的时候更是如此. 以后我们将看到，一个物理系统(包括非力学的)的运动特性由它的 Hamilton 函数决定.

6.1　Hamilton 正则方程：循环坐标和能量积分

下面的讨论假定系统是完整的保守系统. 它的动力学方程由 Lagrange 方程给出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}-\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}=0 \quad (\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{6.1.1}$$

引进广义动量后，上述方程变成 $2s$ 个一阶方程

$$p_\alpha=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha};\quad \dot{p}_\alpha=\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \tag{6.1.2}$$

但是这样做并没有本质的变化. 现在试图改用广义坐标和广义动量 (q_α, p_α) 代替 $(q_\alpha, \dot{q}_\alpha)$ 作为独立变量，也就是把 Lagrange 函数 $L(q_\alpha, \dot{q}_\alpha, t)$ 看作复合函数 $L[q_\alpha, \dot{q}_\alpha(q_\alpha, p_\alpha), t]$. 从方程(6.1.2)的第一式，可以解出 $\dot{q}_\alpha=\dot{q}_\alpha(q_\alpha, p_\alpha, t)$，代入 Lagrange 函数 $L(q_\alpha, \dot{q}_\alpha, t)$ 即可得到以 (q_α, p_α) 作为独立变量的 Lagrange 函数，令为 $\bar{L}=L[q_\alpha, \dot{q}_\alpha(q_\alpha, p_\alpha, t), t]$. 问题是独立变量变化后，方程(6.1.1)如何变化呢？显然

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial q_\alpha}=\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}+\sum_{\sigma=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\sigma}\frac{\partial \dot{q}_\sigma}{\partial q_\alpha} \tag{6.1.3}$$

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial p_\alpha}=\sum_{\sigma=1}^{s}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\sigma}\frac{\partial \dot{q}_\sigma}{\partial p_\alpha} \tag{6.1.4}$$

注意：尽管 $\bar{L}=L$，但 $\partial\bar{L}/\partial q_\alpha \neq \partial L/\partial q_\alpha$，因为 $\bar{L}$ 以 (q_α, p_α) 为独立变量，而 L 以 $(q_\alpha, \dot{q}_\alpha)$ 作为独立变量. 由方程(6.1.2)得到

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial q_\alpha}=\dot{p}_\alpha+\sum_{\sigma=1}^{s}p_\sigma\frac{\partial \dot{q}_\sigma}{\partial q_\alpha} \tag{6.1.5}$$

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial p_\alpha}=\sum_{\sigma=1}^{s} p_\sigma \frac{\partial \dot{q}_\sigma}{\partial p_\alpha} \tag{6.1.6}$$

以上两个方程(6.1.5)和(6.1.6)就是以(q_α, p_α)为独立变量的“变形”Lagrange 方程. 但这两个方程含有偏导数 $\partial\dot{q}_\sigma/\partial q_\alpha$ 和 $\partial\dot{q}_\sigma/\partial p_\alpha$，必须从方程(6.1.2)的第一式解出 $\dot{q}_\alpha=\dot{q}_\alpha(q_\alpha, p_\alpha, t)$，然后求偏导数. 为了消除这个缺点，注意到方程(6.1.5)和(6.1.6)右边的求和

$$\sum_{\sigma=1}^{s} p_\sigma \frac{\partial \dot{q}_\sigma}{\partial q_\alpha}=\sum_{\sigma=1}^{s} \frac{\partial}{\partial q_\alpha}(p_\sigma \dot{q}_\sigma); \quad \sum_{\sigma=1}^{s} p_\sigma \frac{\partial \dot{q}_\sigma}{\partial p_\alpha}=\sum_{\sigma=1}^{s} \frac{\partial}{\partial p_\alpha}(p_\sigma \dot{q}_\sigma)-\dot{q}_\alpha$$

利用上两式，方程(6.1.5)和(6.1.6)可以改写成

$$\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\left(\sum_{\sigma=1}^{s} p_\sigma \dot{q}_\sigma-\bar{L}\right)=-\dot{p}_\alpha; \quad \frac{\partial}{\partial p_\alpha}\left(\sum_{\sigma=1}^{s} p_\sigma \dot{q}_\sigma-\bar{L}\right)=\dot{q}_\alpha \tag{6.1.7}$$

其中 $\alpha=1,2,\cdots,s$. 上式括号内的项称为 **Hamilton 函数**

$$H \equiv \sum_{\sigma=1}^{s} p_\sigma \dot{q}_\sigma-\bar{L} \tag{6.1.8}$$

因此

$$\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}=-\dot{p}_\alpha; \quad \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}=\dot{q}_\alpha \quad (\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{6.1.9}$$

称为 **Hamilton 正则方程**. “正则”是指方程的形式简单而对称. Hamilton 正则方程是描述系统运动的 $2s$ 个一阶微分方程. 注意：Hamilton 函数 H 应以广义坐标和广义动量(q_α, p_α)为独立变量.

从 L 和 H 的全微分也可导出 Hamilton 正则方程. Lagrange 函数的全微分为

$$\begin{aligned} \mathrm{d}L &= \sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}\mathrm{d}q_\alpha+\sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\mathrm{d}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \\ &= \sum_{\alpha=1}^{s} \dot{p}_\alpha \mathrm{d}q_\alpha+\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \mathrm{d}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{6.1.10}$$

而 Hamilton 函数的全微分为

$$\mathrm{d}H=\mathrm{d}\left(\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \dot{q}_\alpha-\bar{L}\right)=\sum_{\alpha=1}^{s} \dot{q}_\alpha \mathrm{d}p_\alpha+\sum_{\alpha=1}^{s}(-\dot{p}_\alpha)\mathrm{d}q_\alpha-\frac{\partial L}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{6.1.11}$$

另一方面

$$\mathrm{d}H=\sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\mathrm{d}p_\alpha+\sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\mathrm{d}q_\alpha+\frac{\partial H}{\partial t}\mathrm{d}t \tag{6.1.12}$$

比较式(6.1.11)和(6.1.12)即可得到 Hamilton 正则方程(6.1.9). 另外，显然有关系

$$\frac{\partial H}{\partial t}=-\frac{\partial L}{\partial t} \tag{6.1.13}$$

如果 L 不显含时间，那么 H 也不显含时间. 把式(6.1.11)写成

$$\mathrm{d}H = \mathrm{d}\left(\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \dot{q}_\alpha\right) - \mathrm{d}L \tag{6.1.14}$$

因此当独立变量从$(q_\alpha, \dot{q}_\alpha)$变成$(q_\alpha, p_\alpha)$时，利用微分关系，函数也从 L 变成 H，这样的变换称为 **Legendre 变换**.

通常把广义坐标和广义动量(q_α, p_α)称为**正则共轭量**. 我们从量纲分析看其意义

$$[p_\alpha q_\alpha] = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} q_\alpha\right] = \left[\frac{L}{q_\alpha / t} q_\alpha\right] = [Lt]$$

$[Lt]$即“能量×时间”，为角动量量纲，在量子力学中起着关键的作用. 表征微观与宏观区别的量 Planck 常量就具有角动量量纲(见第 13 章讨论). 而$[q_\alpha \dot{q}_\alpha] = [q_\alpha^2 / t]$的量纲依赖于 q_α 的选择.

例 6.1.1 求带电粒子的 Hamilton 量.

解： 由式(5.3.19)

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\boldsymbol{r}}^2 - q(\Phi - \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{A}) \tag{6.1.15}$$

广义坐标和广义速度分别为(x, y, z)和$(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$，故广义动量为

$$\begin{aligned} P_x &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + q\frac{\partial}{\partial \dot{x}}(\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) = m\dot{x} + qA_x \\ P_y &= \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} + q\frac{\partial}{\partial \dot{y}}(\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) = m\dot{y} + qA_y \\ P_z &= \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} + q\frac{\partial}{\partial \dot{z}}(\dot{x}A_x + \dot{y}A_y + \dot{z}A_z) = m\dot{z} + qA_z \end{aligned} \tag{6.1.16}$$

写成矢量形式为

$$\boldsymbol{P} = m\dot{\boldsymbol{r}} + q\boldsymbol{A} \tag{6.1.17}$$

因此 Hamilton 函数

$$\begin{aligned} H &= P_x\dot{x} + P_y\dot{y} + P_x\dot{z} - L \\ &= (m\dot{\boldsymbol{r}} + q\boldsymbol{A}) \cdot \dot{\boldsymbol{r}} - \frac{1}{2} m\dot{\boldsymbol{r}}^2 + q(\Phi - \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{A}) \\ &= \frac{1}{2m}(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A})^2 + q\Phi \end{aligned} \tag{6.1.18}$$

介绍几个重要的结论.

循环坐标：如果 Hamilton 函数 H 不显含广义坐标 q_σ，那么由正则方程(6.1.9)得到 $\dot{p}_\sigma = 0$，即相应的广义动量守恒，称 q_σ 为**循环坐标**(或可遗坐标). 注意：尽管从 Lagrange 方程也能得到相同的结论，即方程(5.3.7)，但有本质的区别. Lagrange 函数中不显含广义坐标 q_σ，并不能说 L 中不含 $\dot{q}_\sigma$，因此整个问题仍然有 s 个自由度. 但在 H 中广义坐标 q_σ 是独立变量，由 $p_\sigma = c$(c 为常量)代入 Hamilton 函数，就少了一个自由度.

能量积分:与 Lagrange 力学中一样,我们可以导出能量积分. 事实上

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha+\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial t} \tag{6.1.19}$$

由正则方程(6.1.9)代入(6.1.19)有

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\sum_{\alpha=1}^{s}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial H}{\partial t}=\frac{\partial H}{\partial t} \tag{6.1.20}$$

如果 H 不显含时间,$\mathrm{d}H/\mathrm{d}t=0$,因而 $H=E$(E 为常量). 当系统为稳定约束时,$H=T+U=E$,即在稳定约束时,H 就等于系统的总能量. 可见,从正则方程得到能量积分比从 Lagrange 方程要简单得多!

必须指出:如果用正则方程(6.1.9)来求质点的运动方程远不如 Lagrange 方程简单,必须从 Lagrange 函数转到 Hamilton 函数:从 Lagrange 函数求出广义动量,然后消去广义速度. 而在 Lagrange 力学中,直接从 Lagrange 函数就可以得到质点的运动方程. 事实上,比之 Lagrange 力学,Hamilton 力学的优点在于两个方面:①可以推广到微观粒子,进行量子化,我们将在第 13 章讨论;②便于变量变换,在 Lagrange 力学中,广义坐标的变换必引起广义速度的变化,而在 Hamilton 力学中,广义坐标与广义动量是独立的变量,不仅可以单独对广义坐标或广义动量进行变换,也可以对广义坐标和广义动量同时进行变换,我们将在 6.4 节中介绍.

例 6.1.2 用柱坐标和球坐标分别写出质点 m 在势场中运动的 Hamilton 函数.

解: (1) 柱坐标(r,φ,z),变换关系为 $x=r\cos\varphi, y=r\sin\varphi, z=z$,故

$$\begin{aligned}\dot{x}&=\dot{r}\cos\varphi-r\dot{\varphi}\sin\varphi\\ \dot{y}&=\dot{r}\sin\varphi+r\dot{\varphi}\cos\varphi\\ \dot{z}&=\dot{z}\end{aligned} \tag{6.1.21}$$

因此 Lagrange 函数为

$$\begin{aligned}L&=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)-U(x,y,z)\\ &=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\varphi}^2+\dot{z}^2)-U(r\cos\varphi,r\sin\varphi,z)\end{aligned} \tag{6.1.22}$$

广义动量为

$$p_r=\frac{\partial L}{\partial \dot{r}}=m\dot{r},\quad p_\varphi=\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}=mr^2\dot{\varphi},\quad p_z=m\dot{z} \tag{6.1.23}$$

可见,p_r 为柱坐标中的径向线动量,p_φ 为相对于 z 轴的角动量,而 p_z 为 z 方向的线动量. Hamilton 函数为

$$\begin{aligned}H&=p_r\dot{r}+p_\varphi\dot{\varphi}+p_z\dot{z}-L\\ &=\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\varphi^2}{r^2}+p_z^2\right)+U(r\cos\varphi,r\sin\varphi,z)\end{aligned} \tag{6.1.24}$$

(2) 球坐标(r,ϑ,φ)，变换关系为

$$x = r\sin\vartheta\cos\varphi,\quad y = r\sin\vartheta\sin\varphi,\quad z = r\cos\vartheta$$

故

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \dot{r}\sin\vartheta\cos\varphi + r\dot{\vartheta}\cos\vartheta\cos\varphi - r\dot{\varphi}\sin\vartheta\sin\varphi\\ \dot{y} &= \dot{r}\sin\vartheta\sin\varphi + r\dot{\vartheta}\cos\vartheta\sin\varphi + r\dot{\varphi}\sin\vartheta\cos\varphi\\ \dot{z} &= \dot{r}\cos\vartheta - r\dot{\vartheta}\sin\vartheta\end{aligned}\tag{6.1.25}$$

因此 Lagrange 函数为

$$\begin{aligned}L &= \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(x,y,z)\\ &= \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\vartheta}^2 + r^2\dot{\varphi}^2\sin^2\vartheta) - U(r\sin\vartheta\cos\varphi, r\sin\vartheta\sin\varphi, r\cos\vartheta)\end{aligned}\tag{6.1.26}$$

广义动量为

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r},\quad p_\vartheta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vartheta}} = mr^2\dot{\vartheta},\quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}\sin^2\vartheta\tag{6.1.27}$$

可见，p_r 为球坐标中的径向线动量，p_φ 和 p_ϑ 为相对于原点的角动量分量. Hamilton 函数为

$$\begin{aligned}H = p_r\dot{r} + p_\vartheta\dot{\vartheta} + p_\varphi\dot{\varphi} - L &= \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\vartheta}\right)\\ &+ U(r\sin\vartheta\cos\varphi, r\sin\vartheta\sin\varphi, r\cos\vartheta)\end{aligned}\tag{6.1.28}$$

考虑电子围绕氢原子核的运动，球坐标下 Hamilton 函数为

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\vartheta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\vartheta}\right) - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\tag{6.1.29}$$

代入正则方程(6.1.9)得到

$$\begin{aligned}&\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\vartheta^2}{mr^3} + \frac{p_\varphi^2}{mr^3\sin^2\vartheta} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2};\\ &\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m};\quad \dot{p}_\vartheta = -\frac{\partial H}{\partial \vartheta} = \frac{p_\varphi^2\cos\vartheta}{mr^2\sin^3\vartheta};\\ &\dot{\vartheta} = \frac{\partial H}{\partial p_\vartheta} = \frac{p_\vartheta}{mr^2};\quad \dot{p}_\varphi = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0;\\ &\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2\sin^2\vartheta}\end{aligned}\tag{6.1.30}$$

可见用正则方程(6.1.9)反而没有牛顿方程来得简便.

例 6.1.3　求两体问题的 Hamilton 函数.

解：　在同一惯性坐标系内，设质点 m 和 M 的位置矢量分别为 $\boldsymbol{r}_m$ 和 $\boldsymbol{r}_M$，那么两体系统的动能为

$$T=\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}_m^2+\frac{1}{2}M\dot{\boldsymbol{r}}_M^2 \tag{6.1.31}$$

设相对坐标和质心坐标分别为 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_m-\boldsymbol{r}_M$ 和 $\boldsymbol{r}_c=(M\boldsymbol{r}_M+m\boldsymbol{r}_m)/(M+m)$，于是

$$\boldsymbol{r}_m=\boldsymbol{r}_c+\frac{M}{M+m}\boldsymbol{r};\quad \boldsymbol{r}_M=\boldsymbol{r}_c-\frac{m}{M+m}\boldsymbol{r} \tag{6.1.32}$$

代入式(6.1.31)得到

$$\begin{aligned}T&=\frac{1}{2}m\left(\dot{\boldsymbol{r}}_c+\frac{M}{M+m}\dot{\boldsymbol{r}}\right)^2+\frac{1}{2}M\left(\dot{\boldsymbol{r}}_c-\frac{m}{M+m}\dot{\boldsymbol{r}}\right)^2\\&=\frac{1}{2}(m+M)\dot{\boldsymbol{r}}_c^2+\frac{1}{2}\frac{mM}{m+M}\dot{\boldsymbol{r}}^2\\&=\frac{1}{2}(m+M)(\dot{x}_c^2+\dot{y}_c^2+\dot{z}_c^2)+\frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2+r^2\dot{\vartheta}^2+r^2\sin^2\vartheta\dot{\varphi}^2)\end{aligned} \tag{6.1.33}$$

假定两质点的作用势仅与相对距离 $r=|\boldsymbol{r}_m-\boldsymbol{r}_M|$ 有关，即 $U(r)$，系统的 Lagrange 函数为

$$L=T-U \tag{6.1.34}$$

因此六个广义动量为

$$\begin{aligned}&p_{x_c}=(m+M)\dot{x}_c;\quad p_{y_c}=(m+M)\dot{y}_c;\quad p_{z_c}=(m+M)\dot{z}_c\\&p_r=\frac{\partial L}{\partial\dot{r}}=\mu\dot{r};\quad p_\vartheta=\frac{\partial L}{\partial\dot{\vartheta}}=\mu r^2\dot{\vartheta};\quad p_\varphi=\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}=\mu r^2\dot{\varphi}\sin^2\vartheta\end{aligned} \tag{6.1.35}$$

故系统的 Hamilton 函数为

$$\begin{aligned}H=T+U&=\frac{1}{2(m+M)}(p_{x_c}^2+p_{y_c}^2+p_{z_c}^2)\\&+\frac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\frac{p_\vartheta^2}{r^2}+\frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\vartheta}\right)+U(r)\end{aligned} \tag{6.1.36}$$

显然 Hamilton 函数不含广义坐标(x_c,y_c,z_c)和 φ，故相应的广义动量均为运动常数，又 Hamilton 函数不显含时间，故能量守恒. 由下列正则方程和广义动量

$$\dot{p}_\vartheta=-\frac{\partial H}{\partial\vartheta}=\frac{\cos\vartheta}{\mu r^2\sin^3\vartheta}p_\varphi^2;\quad p_\vartheta=\frac{\partial L}{\partial\dot{\vartheta}}=\mu r^2\dot{\vartheta} \tag{6.1.37}$$

可求另外一个运动常量. 事实上，上两式相乘得到

$$p_\vartheta\dot{p}_\vartheta=\frac{\cos\vartheta}{\sin^3\vartheta}\dot{\vartheta}p_\varphi^2 \tag{6.1.38}$$

注意到 p_φ 为运动常量，故

$$\int p_\vartheta\mathrm{d}p_\vartheta=p_\varphi^2\int\frac{\cos\vartheta}{\sin^3\vartheta}\mathrm{d}\vartheta \tag{6.1.39}$$

即

$$p_\vartheta^2+\frac{p_\varphi^2}{\sin^2\vartheta}=\text{常量} \tag{6.1.40}$$

6.2　Louville 定理、Poisson 括号和 Poisson 定理

从正则方程，可导出 Hamilton 力学中的一个重要定理，即 Louville 定理. 由牛顿动力学方程或者 Lagrange 方程或者 Hamilton 方程，只要给定每个质点的初始位置和速度，原则上可由正则方程求每个质点的运动轨迹，但当系统的质点数很大(达到 10^{23} 量级)时，实际上这是不可能的，也没有必要. 我们只要求判断大数目全同系统运动的平均性质，我们将在第 21 章再详细讨论. 正则方程(6.1.9)用 $2s$ 个独立变量$(q_\alpha, p_\alpha)(\alpha=1,2,\cdots,s)$来描写自由度为 s 的力学系统. 以 $2s$ 个变量(q_α, p_α)为直角坐标，可以构成一个 $2s$ 维空间，这个空间称为**相空间**. 相空间中任一点代表力学系统的一个确定状态，这个点称为**相点**. 当时间变化时，力学系统的运动状态改变，因此相点将在相空间中运动，从而画出一条曲线，称为**相轨道**. 在给定初始条件的情况下，相轨道由正则方程唯一决定. 相轨道是互不相交的，否则正则方程(6.1.9)的解不唯一. 当 s 很大时，相轨道足够稠密，可用密度概念来描述：设相空间中的体元为

$$d\tau = dq_1 dq_2 \cdots dq_s dp_1 dp_2 \cdots dp_s \tag{6.2.1}$$

在 $d\tau$ 内有 dn 个相点，那么密度定义为 $dn=\rho d\tau$. 一般，密度是(q_α, p_α)和时间的函数，于是

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha + \frac{\partial\rho}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha\right) \tag{6.2.2}$$

定义相点的流矢量

$$\boldsymbol{j} = \sum_{\alpha=1}^{s}\rho(\dot{q}_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha + \dot{p}_\alpha\boldsymbol{\beta}_\alpha) \tag{6.2.3}$$

其中 $\boldsymbol{e}_\alpha$ 和 $\boldsymbol{\beta}_\alpha$ 分别是 q_α 和 p_α 轴方向的单位矢量. 在相空间中取体积为 V 的区域，其面积为 S. 显然单位时间内，通过面积元 $d\boldsymbol{S}$ 的相点数为 $dn=\boldsymbol{j}\cdot d\boldsymbol{S}$. 体积元 $d\tau$ 内相点数的变化应该等于流进和流出的相点数之和，即

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho d\tau + \oint_S \boldsymbol{j}\cdot d\boldsymbol{S} = 0 \tag{6.2.4}$$

在 $2s$ 空间利用散度定理

$$\int_V\left[\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial(\rho\dot{q}_\alpha)}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial(\rho\dot{p}_\alpha)}{\partial p_\alpha}\right)\right]d\tau = 0 \tag{6.2.5}$$

由 $d\tau$ 的任意性，得到

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^{s}\left[\frac{\partial(\rho\dot{q}_\alpha)}{\partial q_\alpha} + \frac{\partial(\rho\dot{p}_\alpha)}{\partial p_\alpha}\right] = 0 \tag{6.2.6}$$

由(6.2.6)式和方程(6.2.2)得

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=-\rho\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\dot{q}_\alpha}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial\dot{p}_\alpha}{\partial p_\alpha}\right) \tag{6.2.7}$$

再利用正则方程(6.1.9),(6.2.7)式变成

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=-\rho\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\equiv 0 \tag{6.2.8}$$

因此相空间密度守恒,这就是 **Louville 定理**,它是统计力学的基础. 利用正则方程(6.1.9),方程(6.2.6)也可以写成

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{s}\left[\frac{\partial\rho}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial\rho}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right]=0 \tag{6.2.9}$$

当系统达到平衡时,相空间密度不显含时间,故

$$\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial\rho}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)=0 \tag{6.2.10}$$

Poisson 括号:对任意两个物理量 $\varphi(p_\alpha,q_\alpha,t)$ 和 $\psi(p_\alpha,q_\alpha,t)$,定义 Poisson 括号为

$$[\varphi,\psi]\equiv\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial q_\alpha}\frac{\partial\psi}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial\varphi}{\partial p_\alpha}\frac{\partial\psi}{\partial q_\alpha}\right) \tag{6.2.11}$$

显然 $\varphi(p_\alpha,q_\alpha,t)$ 的时间变化率为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}&=\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial q_\alpha}\dot{q}_\alpha+\frac{\partial\varphi}{\partial p_\alpha}\dot{p}_\alpha\right)\\&=\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial q_\alpha}\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial\varphi}{\partial p_\alpha}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\equiv\frac{\partial\varphi}{\partial t}+[\varphi,H]\end{aligned} \tag{6.2.12}$$

如果物理量不显含时间 $\varphi(p_\alpha,q_\alpha)$ 且 $[\varphi,H]=0$,那么 φ 是一个守恒量,即 $\varphi=c$(c 为常数)是一个运动积分. 当 $[\varphi,H]=0$,称 φ 与 Hamilton 函数对易;如果物理量显含时间 $\varphi(p_\alpha,q_\alpha,t)$,但

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\varphi}{\partial t}+[\varphi,H]=0 \tag{6.2.13}$$

称 $\varphi(p_\alpha,q_\alpha,t)$ 为含时守恒量. 显然相空间密度是含时守恒量,利用 Poisson 括号,方程(6.2.9)可写成简洁的形式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+[\rho,H]=0 \tag{6.2.14}$$

基本的 Poisson 括号有

$$[q_\alpha,q_\beta]=0,\quad [p_\alpha,p_\beta]=0,\quad [q_\alpha,p_\beta]=\delta_{\alpha\beta} \tag{6.2.15}$$

即:(1) 广义坐标或者广义动量分别两两对易;(2) 广义坐标与相应的广义动量不对易;(3) 广义坐标与非对应的广义动量对易. Poisson 括号有以下基本性质:

$$[C,\psi]=0;\quad [\varphi,\psi]+[\psi,\varphi]=0;\quad [\psi,\psi]=0 \tag{6.2.16}$$

$$[\varphi,\psi_1\psi_2]=\psi_1[\varphi,\psi_2]+[\varphi,\psi_1]\psi_2 \tag{6.2.17}$$

$$[\varphi,\sum_{j=1}^{n}\psi_j]=\sum_{j=1}^{n}[\varphi,\psi_j] \tag{6.2.18}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\varphi,\psi]=\left[\frac{\partial\varphi}{\partial t},\psi\right]+\left[\varphi,\frac{\partial\psi}{\partial t}\right] \tag{6.2.19}$$

$$[\phi,[\varphi,\psi]]+[\varphi,[\psi,\phi]]+[\psi,[\phi,\varphi]]=0 \tag{6.2.20}$$

最后一式称为 **Jacobi 恒等式**，可由 Poisson 括号定义直接证明(习题 6.10).

Poisson 定理：如果 φ 和 ψ 是系统的守恒量，则$[\varphi,\psi]$也是系统的守恒量. 事实上，因 φ 和 ψ 是系统的守恒量，即存在关系

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+[\varphi,H]=0,\quad \frac{\partial\psi}{\partial t}+[\psi,H]=0 \tag{6.2.21}$$

故

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\varphi,\psi]&=\frac{\partial}{\partial t}[\varphi,\psi]+[[\varphi,\psi],H]\\&=\left[\frac{\partial\varphi}{\partial t},\psi\right]+\left[\varphi,\frac{\partial\psi}{\partial t}\right]+[[\varphi,\psi],H]\\&=[\psi,[\varphi,H]]-[\varphi,[\psi,H]]-[H,[\varphi,\psi]]\\&=[\psi,[\varphi,H]]-[\varphi,[\psi,H]]+[\varphi,[\psi,H]]+[\psi,[H,\varphi]]\\&=0\end{aligned}$$

其中应用了恒等式(6.2.16)～(6.2.20). 当然，守恒量$[\varphi,\psi]$可能是不独立的(即可能是 φ 和 ψ 的组合)，因为一个系统的守恒量是有限的.

例 6.2.1 求 Poisson 括号

$$[J_y,J_z],\quad [J_z,J_x],\quad [J_x,J_y],\quad [J_i,J^2]\quad (i=x,y,z).$$

其中 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 是质点的动量矩.

解： 广义坐标和广义动量分别为直角坐标和粒子的线动量

$$\begin{aligned}[J_y,J_z]&=[(zp_x-xp_z),(xp_y-yp_x)]\\&=[zp_x,xp_y]-[zp_x,yp_x]-[xp_z,xp_y]+[xp_z,yp_x]\end{aligned} \tag{6.2.22}$$

利用式(6.2.17)

$$[zp_x,xp_y]=zx[p_x,p_y]+z[p_x,x]p_y+x[z,p_y]p_x+[z,x]p_yp_x$$

根据对易关系(6.2.15)，上式中只有第二项不为零，即

$$[zp_x,xp_y]=-zp_y \tag{6.2.23}$$

同理：$[zp_x,yp_x]=0$，$[xp_z,xp_y]=0$ 和$[xp_z,yp_x]=yp_z$，代入式(6.2.22)得

$$[J_y,J_z]=yp_z-zp_y=J_x \tag{6.2.24}$$

同样计算可得

$$[J_z,J_x]=J_y,\quad [J_x,J_y]=J_z \tag{6.2.25}$$

下面求角动量平方与分量的对易关系

$$
\begin{aligned}
[J_i,J^2] &= [J_i,J_x^2+J_y^2+J_z^2] \\
&= [J_i,J_x^2]+[J_i,J_y^2]+[J_i,J_z^2] \\
&= J_x[J_i,J_x]+[J_i,J_x]J_x+J_y[J_i,J_y] \\
&\quad +[J_i,J_y]J_y+J_z[J_i,J_z]+[J_i,J_z]J_z
\end{aligned} \tag{6.2.26}
$$

当 $i=x$ 时

$$
\begin{aligned}
[J_x,J^2] &= J_y[J_x,J_y]+[J_x,J_y]J_y+J_z[J_x,J_z]+[J_x,J_z]J_z \\
&= J_yJ_z+J_zJ_y+J_z(-J_y)+(-J_y)J_z=0
\end{aligned} \tag{6.2.27}
$$

同理可得到其他二个对易关系. 故角动量平方与每个分量对易，在量子力学中具有同样的关系，我们将在第 14 章讨论. 顺便提一下，由 Poisson 定理和式(6.2.24)和(6.2.25)，如果质点角动量有两个分量守恒，那么第三个分量也守恒.

6.3　Hamilton 原理和弹性体的 Hamilton 原理

力学系统从时刻 t_1 到时刻 t_2 的一切可能(即满足约束条件)的运动之中，真实运动使 **Hamilton 作用量** S 取极值，即

$$
\delta S=0 \tag{6.3.1}
$$

其中

$$
S=\int_{t_1}^{t_2}L(q_\alpha,\dot{q}_\alpha,t)\mathrm{d}t \tag{6.3.2}
$$

方程(6.3.1)称为 **Hamilton 原理**，S 也称为主函数. 因此动力学问题变成一个求泛函的极值问题. 显然

$$
\delta S=\int_{t_1}^{t_2}\delta L(q_\alpha,\dot{q}_\alpha,t)\mathrm{d}t=\sum_{\alpha=1}^{s}\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta\dot{q}_\alpha\right)\mathrm{d}t \tag{6.3.3}
$$

对第二项分部积分得到

$$
\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta\dot{q}_\alpha\mathrm{d}t &= \int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\mathrm{d}\delta q_\alpha=\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta q_\alpha\right)\Bigg|_{t_1}^{t_2} \\
&\quad -\int_{t_1}^{t_2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta q_\alpha\mathrm{d}t
\end{aligned} \tag{6.3.4}
$$

代入式(6.3.3)

$$
\begin{aligned}
\delta S &= \int_{t_1}^{t_2}\delta L(q_\alpha,\dot{q}_\alpha,t)\mathrm{d}t \\
&= \sum_{\alpha=1}^{s}\left[\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\delta q_\alpha\right)\Bigg|_{t_1}^{t_2}+\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)\delta q_\alpha\mathrm{d}t\right]
\end{aligned} \tag{6.3.5}
$$

如果系统初态和末态的位形一定，即 $\delta q_\alpha(t_1)=\delta q_\alpha(t_2)\equiv 0$，则

$$\delta S=\sum_{\alpha=1}^{s}\int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}\right)\delta q_\alpha \mathrm{d}t=0 \tag{6.3.6}$$

对任意变分 δq_α 上式恒成立的条件是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}-\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}=0 \quad (\alpha=1,2,\cdots,s) \tag{6.3.7}$$

与 Lagrange 方程完全一样！以上把$(q_\alpha,\dot{q}_\alpha)$作为独立变量，如果独立变量换成$(q_\alpha,p_\alpha)$，由

$$\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2}\left[\sum_{\alpha=1}^{s}p_\alpha\dot{q}_\alpha-H(p_\alpha,q_\alpha,t)\right]\mathrm{d}t=0 \tag{6.3.8}$$

给出

$$\int_{t_1}^{t_2}\sum_{\alpha=1}^{s}\left(p_\alpha\delta\dot{q}_\alpha+\dot{q}_\alpha\delta p_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\delta q_\alpha\right)\mathrm{d}t=0 \tag{6.3.9}$$

上式左边第一项为

$$\begin{aligned}\int_{t_1}^{t_2}p_\alpha\delta\dot{q}_\alpha\mathrm{d}t&=\int_{t_1}^{t_2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(p_\alpha\delta q_\alpha)-\dot{p}_\alpha\delta q_\alpha\right]\mathrm{d}t\\&=(p_\alpha\delta q_\alpha)\mid_{t_1}^{t_2}-\int_{t_1}^{t_2}\dot{p}_\alpha\delta q_\alpha\mathrm{d}t=-\int_{t_1}^{t_2}\dot{p}_\alpha\delta q_\alpha\mathrm{d}t\end{aligned} \tag{6.3.10}$$

代入方程(6.3.9)得到

$$\int_{t_1}^{t_2}\sum_{\alpha=1}^{s}\left[\left(\dot{q}_\alpha-\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\right)\delta p_\alpha-\left(\dot{p}_\alpha+\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right)\delta q_\alpha\right]\mathrm{d}t=0 \tag{6.3.11}$$

而 δp_α 和 δq_α 是独立变分，于是

$$\dot{q}_\alpha=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha};\quad \dot{p}_\alpha=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \tag{6.3.12}$$

即为 Hamilton 正则方程(6.1.9). 从方程(6.3.2)可见，如果 Lagrange 函数变成 $L'=L+\mathrm{d}U/\mathrm{d}t$，其中 $U=U(q_\alpha,t)$那么

$$\delta S'=\delta\int_{t_1}^{t_2}L'(q_\alpha,\dot{q}_\alpha,t)\mathrm{d}t=\delta S+\delta\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}U=\delta S+\delta U\mid_{t_1}^{t_2}=\delta S$$

即不改变 Hamilton 原理. 因此说 Lagrange 函数不是唯一的！这一性质很有用处.

从 Hamilton 原理可以导出 Lagrange 方程和 Hamilton 方程，那么引进 Hamilton 原理有什么意义呢？原因有：①Hamilton 原理是时间的积分而不是广义坐标的积分，所以与广义坐标的选择无关；②它不仅对有有限个自由度的力学系统成立，而且对有无限自由度的力学系统也成立，更可以推广到非力学系统，这也是 Hamilton 原理的意义所在.

下面给出从 d'Alembert 原理"推导"Hamilton 原理的过程. 由方程(5.1.19)

$$\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{F}_i-m_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i)\cdot\delta\boldsymbol{r}_i=0 \tag{6.3.13}$$

首先看第二项

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \ddot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i = \sum_{i=1}^{n} m_i \frac{\mathrm{d}\dot{\boldsymbol{r}}}{\mathrm{d}t} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i = \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i) - m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \dot{\boldsymbol{r}}_i \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i) - \delta\left(\frac{1}{2} m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_i \right) \right]$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i) - \delta T_i \right]$$

上式两边对时间积分得到

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_{i=1}^{n} m_i \ddot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i \right) \mathrm{d}t = \sum_{i=1}^{n} \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}_i) - \delta T_i \right] \mathrm{d}t$$

$$= \left[\sum_{i=1}^{n} (m_i \dot{\boldsymbol{r}} \cdot \delta \boldsymbol{r}) \right] \Big|_{t_1}^{t_2} - \delta\left(\int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^{n} T_i \mathrm{d}t \right) = -\delta\left(\int_{t_1}^{t_2} T \mathrm{d}t \right) \tag{6.3.14}$$

其中

$$T = \sum_{i=1}^{n} T_i \tag{6.3.15}$$

是总动能. 再看方程(6.3.13)的第一项

$$\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{F}_i \cdot \delta \boldsymbol{r}_i = \delta\left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{F}_i \cdot \boldsymbol{r}_i \right) \equiv \delta W \tag{6.3.16}$$

把上式和式(6.3.14)代入方程(6.3.13)得到

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T + W) \mathrm{d}t = 0 \tag{6.3.17}$$

上式为一般情况下的 Hamilton 原理. 利用广义力的定义式(5.1.13)

$$\delta W = \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{F}_i \cdot \delta \boldsymbol{r}_i = \sum_{i=1}^{n} \sum_{\alpha=1}^{s} \boldsymbol{F}_i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha} \delta q_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{s} Q_\alpha \delta q_\alpha \tag{6.3.18}$$

如果广义力有势 $Q_\alpha = -\partial U / \partial q_\alpha$,那么(6.3.17)可写成

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - U) \mathrm{d}t = \delta \int_{t_1}^{t_2} L \mathrm{d}t = 0 \tag{6.3.19}$$

这正是 Hamilton 原理.

例 6.3.1 由 Hamilton 原理求氢原子中电子绕核的运动.

解: 在极坐标下,Lagrange 函数为

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{6.3.20}$$

代入 Hamilton 原理

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \left[m\dot{r}\delta\dot{r} + mr\dot{\varphi}^2 \delta r + mr^2 \dot{\varphi} \delta \dot{\varphi} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \delta r \right] \mathrm{d}t = 0 \tag{6.3.21}$$

因为

$$\dot{r}\delta\dot{r} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\dot{r}\delta r) - \ddot{r}\delta r; \quad r^2 \dot{\varphi} \delta \dot{\varphi} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r^2 \dot{\varphi} \delta \varphi) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r^2 \dot{\varphi}) \delta \varphi \tag{6.3.22}$$

代入式(6.3.21)并且分部积分

$$m(\dot{r}\delta r + r^2\dot{\varphi}\delta\varphi)\big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2}\left(m\ddot{r} - mr\dot{\varphi}^2 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\right)\delta r\mathrm{d}t$$

$$-\int_{t_1}^{t_2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mr^2\dot{\varphi})\delta\varphi\mathrm{d}t = 0 \tag{6.3.23}$$

而 $\delta r|_{t_1}=\delta r|_{t_2}=0$；$\delta\varphi|_{t_1}=\delta\varphi|_{t_2}=0$，由变分的任意性得到

$$m(\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = 0;\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mr^2\dot{\varphi}) = 0 \tag{6.3.24}$$

即 $mr^2\dot{\varphi}=$常量.

例 6.3.2　各向同性弹性体运动的 Hamilton 原理

解：　弹性体运动的动能密度为

$$t = \frac{1}{2}\rho\left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_2}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_3}{\partial t}\right)^2\right] \tag{6.3.25}$$

由式(3.3.25)，各向同性弹性体的弹性势能密度为

$$w = \frac{1}{2}[(\lambda + 2\mu)(e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) + \mu(e_{12}^2 + e_{13}^2 + e_{23}^2)$$

$$+ 2\lambda(e_{11}e_{22} + e_{11}e_{33} + e_{22}e_{33})] \tag{6.3.26}$$

故弹性体的 Hamilton 原理为

$$\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2}\int(t - w - u)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}t$$

$$= \frac{1}{2}\delta\int_{t_1}^{t_2}\int\begin{bmatrix}\rho[\dot{u}_1^2 + \dot{u}_2^2 + \dot{u}_3^2] - [2\mu(e_{12}^2 + e_{13}^2 + e_{23}^2) \\ + (\lambda + 2\mu)(e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) \\ + 2\lambda(e_{11}e_{22} + e_{11}e_{33} + e_{22}e_{33})] - u\end{bmatrix}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}t = 0 \tag{6.3.27}$$

其中 u 表示体力密度产生的势函数：$\boldsymbol{f} = -\nabla u$. 从上式不难得到弹性体的运动方程，即式(3.4.4)(习题 6.9). 本例说明，Hamilton 原理同样可以推广到连续体(相当于有无限多个自由度)的运动. 不仅如此，Hamilton 原理还可以推广到非力学系统，如电磁场系统，只要写出其正确的 Lagrange 函数(见第 11 章讨论).

6.4　正则变换：正则条件和 Poisson 括号的不变性

由 6.1 节，我们知道 Hamilton 函数有一个循环坐标，力学系统就可以少一个自由度. 当然循环坐标越多越好. 但循环坐标是否存在或者多少与广义坐标的选择有关. 一个简单的例子是质点在有心力场中的运动，如果用极坐标来讨论，Lagrange 函数为

$$L = T - U = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + \frac{\alpha}{r} \tag{6.4.1}$$

其中 α 为常量，而

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}; \quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi} \tag{6.4.2}$$

相应的 Hamilton 函数为

$$H(p_r, p_\varphi, r, \varphi) = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}\right) - \frac{\alpha}{r} \tag{6.4.3}$$

H 不显含 φ，故是一个循环坐标：$\dot{p}_\varphi = \partial H/\partial\varphi = 0$，即 $mr^2\dot{\varphi} = c$（c 为常量），表示质点的角动量守恒. 但若用直角坐标来讨论问题就没有循环坐标. 因此我们希望通过坐标变换，使原来的独立变量 (q_α, p_α) 换成新的变量 (Q_α, P_α)

$$Q_\alpha = Q_\alpha(q_\alpha, p_\alpha, t); \quad P_\alpha = P_\alpha(q_\alpha, p_\alpha, t) \tag{6.4.4}$$

在新变量 (Q_α, P_α) 下，新的 Hamilton 函数 $H'(P_\alpha, Q_\alpha)$ 有更多的循环坐标. 但是我们又希望通过变换后，Hamilton 方程仍然保持方程(6.1.9)的正则形式

$$\dot{Q}_\alpha = \frac{\partial H'}{\partial P_\alpha}; \quad \dot{P}_\alpha = -\frac{\partial H'}{\partial Q_\alpha} \tag{6.4.5}$$

满足正则方程形式不变的变换(6.4.4)叫**正则变换**. 从方程(6.3.8)，对独立变量 (q_α, p_α)

$$\delta S = \delta\int_{t_1}^{t_2}\left[\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha - H(p_\alpha, q_\alpha, t)\mathrm{d}t\right] = 0 \tag{6.4.6}$$

为使新变量 (Q_α, P_α) 满足 Hamilton 方程(6.4.5)，必须成立

$$\delta S' = \delta\int_{t_1}^{t_2}\left[\sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha \mathrm{d}Q_\alpha - H'(P_\alpha, Q_\alpha, t)\mathrm{d}t\right] = 0 \tag{6.4.7}$$

显然当(6.4.6)和(6.4.7)式只差一个全微分时，两个 Hamilton 原理等效. 于是，我们得到式(6.4.4)是正则变换的充要条件

$$\sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha \mathrm{d}Q_\alpha - H'(P_\alpha, Q_\alpha, t)\mathrm{d}t = \sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha - H(p_\alpha, q_\alpha, t)\mathrm{d}t + \mathrm{d}F \tag{6.4.8}$$

写成形式

$$\mathrm{d}F = -\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha \mathrm{d}Q_\alpha + [H(p_\alpha, q_\alpha, t) - H'(P_\alpha, Q_\alpha, t)]\mathrm{d}t \tag{6.4.9}$$

如果函数 F 已知且为 $F = F(q_\alpha, Q_\alpha, t)$，那么

$$\mathrm{d}F = \sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial F}{\partial q_\alpha}\mathrm{d}q_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial F}{\partial Q_\alpha}\mathrm{d}Q_\alpha + \frac{\partial F}{\partial t} \tag{6.4.10}$$

比较(6.4.9)和(6.4.10)式，显然应该有

$$p_\alpha = -\frac{\partial F}{\partial q_\alpha}; \quad P_\alpha = \frac{\partial F}{\partial Q_\alpha}; \quad H' = H - \frac{\partial F}{\partial t} \tag{6.4.11}$$

在函数 $F = F(q_\alpha, Q_\alpha, t)$ 给定下，上式建立起了老变量 (q_α, p_α) 以及新变量 (Q_α, P_α) 的关系，而且给出了新的 Hamilton 函数，故函数 F 称为**母函数**. 如果 Hamilton 函

数和变换(6.4.4)不显含时间，那么函数 F 也不显含时间 $F=F(q_\alpha,Q_\alpha)$，于是$H'=H$. 注意：尽管它们相等，但函数的独立变量不同.

以上我们假定 F 为时间和新、老广义坐标的函数，当然可以是(q_α,p_α)与(Q_α,P_α)的任意一对的函数.

1. 改变方程(6.4.9)右边第一项求和

$$\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha = \mathrm{d}\Big(\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha q_\alpha\Big) - \sum_{\alpha=1}^{s} q_\alpha \mathrm{d}p_\alpha \tag{6.4.12}$$

代入方程(6.4.9)

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha \mathrm{d}Q_\alpha - H'(P_\alpha,Q_\alpha,t)\mathrm{d}t =& -\sum_{\alpha=1}^{s} q_\alpha \mathrm{d}p_\alpha \\ & - H(p_\alpha,q_\alpha,t)\mathrm{d}t + \mathrm{d}\Big(F+\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha q_\alpha\Big)\end{aligned} \tag{6.4.13}$$

令

$$F_1 = F + \sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha q_\alpha \tag{6.4.14}$$

那么

$$\mathrm{d}F_1 = \sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha \mathrm{d}Q_\alpha + \sum_{\alpha=1}^{s} q_\alpha \mathrm{d}p_\alpha + [H(p_\alpha,q_\alpha,t) - H'(P_\alpha,Q_\alpha,t)]\mathrm{d}t \tag{6.4.15}$$

把 F_1 取成形式 $F_1=F_1(p_\alpha,Q_\alpha,t)$，于是有关系

$$q_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial p_\alpha};\quad P_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha};\quad H' = H - \frac{\partial F_1}{\partial t} \tag{6.4.16}$$

2. 改变方程(6.4.9)右边第二项求和

$$\sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha \mathrm{d}Q_\alpha = \mathrm{d}\Big(\sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha Q_\alpha\Big) - \sum_{\alpha=1}^{s} Q_\alpha \mathrm{d}P_\alpha \tag{6.4.17}$$

代入方程(6.4.9)

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\Big(F-\sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha Q_\alpha\Big) =& -\sum_{\alpha=1}^{s} p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{s} Q_\alpha \mathrm{d}P_\alpha \\ & + [H(p_\alpha,q_\alpha,t) - H'(P_\alpha,Q_\alpha,t)]\mathrm{d}t\end{aligned} \tag{6.4.18}$$

把 F_2 取成形式 $F_2=F_2(q_\alpha,P_\alpha,t)$，于是有关系

$$p_\alpha = -\frac{\partial F_2}{\partial q_\alpha};\quad Q_\alpha = -\frac{\partial F_2}{\partial P_\alpha};\quad H' = H - \frac{\partial F_2}{\partial t} \tag{6.4.19}$$

其中

$$F_2 = F - \sum_{\alpha=1}^{s} P_\alpha Q_\alpha \tag{6.4.20}$$

如果能找到一个正则变换，使 $H'=H'(P_\alpha)$，那么所有的广义坐标都是循环坐标，于是 $P_\alpha=c_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,s)$，而 Q_α 就是 $\partial H'/\partial P_\alpha$ 对时间的积分，问题就完全解

决了. 但函数 F、F_1 或者 F_2 的寻找本身就很困难.

正则条件:从正则方程(6.4.5),我们从另一个角度来讨论变换(6.4.4)应该满足的条件. 假定变换式(6.4.4)不显含时间 $Q_\alpha=Q_\alpha(q_\alpha,p_\alpha)$;$P_\alpha=P_\alpha(q_\alpha,p_\alpha)$,且 $H'=H$. 计算

$$\dot{Q}_\alpha=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta+\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\dot{p}_\beta\right)=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial H}{\partial p_\beta}-\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial H}{\partial q_\beta}\right)\tag{6.4.21}$$

$$\dot{P}_\alpha=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial q_\beta}\dot{q}_\beta+\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\dot{p}_\beta\right)=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial H}{\partial p_\beta}-\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial H}{\partial q_\beta}\right)\tag{6.4.22}$$

而

$$\frac{\partial H}{\partial p_\beta}=\sum_{\gamma=1}^{s}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta}-\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}\right);\quad \frac{\partial H}{\partial q_\beta}=\sum_{\gamma=1}^{s}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\beta}-\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta}\right)$$

上式代入(6.4.21)和(6.4.22)得到

$$\begin{aligned}\dot{Q}_\alpha&=\sum_{\gamma,\beta=1}^{s}\left[\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta}-\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}\right)-\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\beta}-\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta}\right)\right]\\&=\sum_{\gamma,\beta=1}^{s}\left[\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta}-\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\beta}\right)+\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}-\frac{\partial Q_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta}\right)\right]\\&=\sum_{\gamma=1}^{s}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}[Q_\alpha,Q_\gamma]+\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}[Q_\alpha,P_\gamma]\right)\end{aligned}$$

显然要方程(6.4.5)第一式成立,则要求

$$[Q_\alpha,Q_\gamma]=0;\quad [Q_\alpha,P_\gamma]=\delta_{\alpha\gamma}\tag{6.4.23}$$

同样可得到

$$\begin{aligned}\dot{P}_\alpha&=\sum_{\gamma,\beta=1}^{s}\left[\frac{\partial P_\alpha}{\partial q_\beta}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta}-\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}\right)-\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\beta}-\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta}\right)\right]\\&=\sum_{\gamma,\beta=1}^{s}\left[\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\beta}-\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\beta}\right)+\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}\left(\frac{\partial P_\alpha}{\partial p_\beta}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\beta}-\frac{\partial P_\alpha}{\partial q_\beta}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\beta}\right)\right]\\&=\sum_{\gamma=1}^{s}\left(\frac{\partial H}{\partial Q_\gamma}[P_\alpha,Q_\gamma]+\frac{\partial H}{\partial P_\gamma}[P_\alpha,P_\gamma]\right)\end{aligned}$$

显然要方程(6.4.5)第二式成立,则要求

$$[P_\alpha,P_\gamma]=0;\quad [P_\alpha,Q_\gamma]=-\delta_{\alpha\gamma}\tag{6.4.24}$$

值得注意的是:条件式(6.4.23)和(6.4.24)与 Hamilton 函数的具体形式无关,因为确定一个正则变换纯粹是一个运动学问题,而与系统的动力学性质(由 Hamilton 函数决定)无关.

Poisson 括号的不变性:正则变换的一个基本性质是 Poisson 括号在正则变换下的不变性,这也是一个正则变换的基本要求. 证明:记物理量 ψ 和 φ 在老变量 (p_α,q_α) 和新变量 (P_α,Q_α) 下的 Poisson 括号分别为 $[\varphi,\psi]_{pq}$ 和 $[\varphi,\psi]_{PQ}$,由 Poisson 括号的定义

$$[\varphi,\psi]_{pq}=\sum_{\alpha=1}^{s}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial q_\alpha}\frac{\partial\psi}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial\varphi}{\partial p_\alpha}\frac{\partial\psi}{\partial q_\alpha}\right)\tag{6.4.25}$$

利用

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial q_\alpha}&=\sum_{\beta=1}^{s}\left(\frac{\partial}{\partial Q_\beta}\frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial}{\partial P_\beta}\frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha}\right)\\ \frac{\partial}{\partial p_\alpha}&=\sum_{\gamma=1}^{s}\left(\frac{\partial}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}+\frac{\partial}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\alpha}\right)\end{aligned}\tag{6.4.26}$$

代入式(6.4.25)得到

$$\begin{aligned}[\varphi,\psi]_{pq}=&\sum_{\alpha,\beta,\gamma=1}^{s}\left[\left(\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial\varphi}{\partial P_\beta}\frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}+\frac{\partial\psi}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\alpha}\right)\right.\\ &\left.-\left(\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha}+\frac{\partial\varphi}{\partial P_\beta}\frac{\partial P_\beta}{\partial p_\alpha}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial Q_\gamma}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}+\frac{\partial\psi}{\partial P_\gamma}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\alpha}\right)\right]\\ =&\sum_{\alpha,\beta,\gamma=1}^{s}\left[\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial Q_\gamma}\left(\frac{\partial Q_\beta}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\right)+\frac{\partial\varphi}{\partial P_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial P_\gamma}\left(\frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial P_\beta}{\partial p_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\alpha}\right)\right.\\ &\left.+\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial P_\gamma}\left(\frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\alpha}-\frac{\partial Q_\beta}{\partial p_\alpha}\frac{\partial P_\gamma}{\partial q_\alpha}\right)+\frac{\partial\varphi}{\partial P_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial Q_\gamma}\left(\frac{\partial P_\beta}{\partial q_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial P_\beta}{\partial p_\alpha}\frac{\partial Q_\gamma}{\partial q_\alpha}\right)\right]\end{aligned}$$

把对 α 求和指标放到括号中并且对调最后一项的求和指标，上式可简写成

$$\begin{aligned}[\varphi,\psi]_{pq}=&\sum_{\beta,\gamma=1}^{s}\left[\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial Q_\gamma}[Q_\beta,Q_\gamma]+\frac{\partial\varphi}{\partial P_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial P_\gamma}[P_\beta,P_\gamma]\right.\\ &\left.+\left(\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial P_\gamma}-\frac{\partial\varphi}{\partial P_\gamma}\frac{\partial\psi}{\partial Q_\beta}\right)[Q_\beta,P_\gamma]\right]\end{aligned}\tag{6.4.27}$$

利用正则条件式(6.4.23)和(6.4.24)

$$[\varphi,\psi]_{pq}=\sum_{\beta}^{s}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial Q_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial P_\beta}-\frac{\partial\varphi}{\partial P_\beta}\frac{\partial\psi}{\partial Q_\beta}\right)=[\varphi,\psi]_{PQ}\tag{6.4.28}$$

即$[\varphi,\psi]_{pq}=[\varphi,\psi]_{PQ}$.

例 6.4.1　利用正则变换求平面谐振子的运动.

解：　二维谐振子的 Hamilton 函数为

$$H=T+U=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2)+\frac{1}{2}m(\omega_1^2x^2+\omega_2^2y^2).\tag{6.4.29}$$

取母函数为

$$F(x,y,Q_1,Q_2)=\frac{1}{2}m(\omega_1x^2\cot Q_1+\omega_2y^2\cot Q_2)\tag{6.4.30}$$

由方程(6.4.11)

$$\begin{aligned}&p_x=-\frac{\partial F}{\partial x}=-m\omega_1x\cot Q_1,\quad p_y=-\frac{\partial F}{\partial y}=-m\omega_2y\cot Q_2\\ &P_1=\frac{\partial F}{\partial Q_1}=-\frac{1}{2}m\omega_1x^2\csc^2Q_1,\quad P_2=\frac{\partial F}{\partial Q_2}=-\frac{1}{2}m\omega_2y^2\csc^2Q_2\end{aligned}\tag{6.4.31}$$

新的 Hamilton 函数为

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2}m[(\omega_1\cot Q_1)^2 + (\omega_2\cot Q_2)^2] + \frac{1}{2}m(\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2) \\ &= \frac{1}{2}m\omega_1^2x^2(1+\cot^2 Q_1) + \frac{1}{2}m\omega_2^2y^2(1+\cot^2 Q_2) \\ &= -(\omega_1 P_1 + \omega_2 P_2)\end{aligned} \tag{6.4.32}$$

显然 Q_1 和 Q_2 都成了循环坐标，于是由正则方程(6.4.5)得到

$$\dot{P}_1 = 0,\quad \dot{P}_2 = 0;\quad \dot{Q}_1 = -\omega_1,\quad \dot{Q}_2 = -\omega_2 \tag{6.4.33}$$

即

$$\begin{aligned}&P_1 = -C_1,\quad P_2 = -C_2 \\ &Q_1 = -\omega_1 t - \delta_1,\quad Q_2 = -\omega_2 t - \delta_2\end{aligned} \tag{6.4.34}$$

式中积分常数取负号是为了形式对称. 上式代入方程(6.4.31)的第一式

$$C_1 = \frac{1}{2}m\omega_1 x^2\csc^2(\omega_1 t + \delta_1),\quad C_2 = \frac{1}{2}m\omega_2 y^2\csc^2(\omega_2 t+\delta_2) \tag{6.4.35}$$

即

$$x = \sqrt{\frac{2C_1}{m\omega_1}}\sin(\omega_1 t + \delta_1);\quad y = \sqrt{\frac{2C_2}{m\omega_2}}\sin(\omega_2 t+\delta_2) \tag{6.4.36}$$

由此可见，用正则变换求解质点的运动关键是找适当的母函数. 本例中我们选取了比较好的母函数，使 Q_1 和 Q_2 都成了循环坐标. 如何选择好的母函数，是 Hamilton 力学求质点运动的关键. 但是我们已指出：Hamilton 力学的更大意义在于它可以推广到其他物理系统，特别是量子系统，而不是用它来求解具体的动力学问题.

习　题　6

6.1　一个质量为 m 的质点在具有势能为 $U(r)$ 的保守力作用下运动，用球坐标 (r,ϑ,φ) 为广义坐标，证明三个运动常量

$$p_\varphi;\quad \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2\sin^2\vartheta} + U(r);\quad p_\vartheta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\vartheta}$$

(提示：Hamilton 函数与 φ 无关，p_φ=常量；Hamilton 函数与时间无关，能量守恒；第三个等式用 $[p_\vartheta^2+p_\varphi^2/\sin^2\vartheta, H]=0$ 证明)

6.2　地球以恒定的角速度 $\boldsymbol{\omega}=\omega\boldsymbol{e}_z$ 相对于惯性参考系运动，$\boldsymbol{e}_z$ 是固定于地球的 z 轴的单位矢量，用固定于地球的三维直角坐标 (x,y,z) 为广义坐标，写出质点 m 在势场中运动的 Hamilton 函数，证明 Hamilton 函数不是质点的总能量，但是一个守恒量. (提示：质点相对于惯性参考系运动的运动速度

$$\boldsymbol{v} = \dot{x}\boldsymbol{e}_x + \dot{y}\boldsymbol{e}_y + \dot{z}\boldsymbol{e}_z + \omega\boldsymbol{e}_z\times(x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{e}_z)$$

Hamilton 函数与时间无关，故 Hamilton 函数守恒)

答案：$H=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+p_x\omega y-p_y\omega x+U(x,y,z)$.

6.3　原子质量为 m 的双原子分子之间的相互作用势为

$$U(r)=-\frac{2A}{r^6}+\frac{B}{r^{12}}$$

$A,B>0$ 且为常量，r 为原子间距离.（1）写出原子系统的 Hamilton 函数；（2）求出系统具有最低能量的平衡状态；（3）若系统处于最低能量状态时，有一个小微扰动，求系统的振动角频率.（提示：取系统的质心坐标(x,y,z)和一个原子相对于另一个原子的球坐标(r,ϑ,φ)为广义坐标）

答案：（1）Hamilton 函数为

$$H=\frac{1}{4m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+\frac{1}{m}\left(p_r^2+\frac{p_\vartheta^2}{r^2}+\frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\vartheta}\right)-\frac{2A}{r^6}+\frac{B}{r^{12}}$$

（2）$r_0=(B/A)^{1/6}$；（3）将 $U(r)$在 r_0 附近展开

$$U(r)\approx U(r_0)+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2U}{\mathrm{d}r^2}\bigg|_{r=r_0}r'^2$$

得到 $\omega=12m^{-1/2}A^{7/6}B^{-2/3}$.

6.4　设 φ 是坐标和动量的标量函数，证明$[\varphi,J_z]=0$.（提示：因为坐标 $\boldsymbol{r}$ 和动量 $\boldsymbol{p}$ 是矢量，故 φ 一定是 r^2、p^2 和 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 的函数

$$\varphi=\varphi(r^2,p^2,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}),\quad J_z=xp_y-yp_x）$$

6.5　质点 m 在有心力

$$\boldsymbol{F}=-\frac{m\alpha}{r^2}\boldsymbol{e}_r$$

作用下运动，其中 α 是常量. 定义矢量

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{J}-m^2\alpha\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

求$[A_i,J_j]$和$[A_i,H]$ $(i,j=x,y)$.（提示：质点在平面运动，设为 xOy 平面

$$\boldsymbol{p}=p_x\boldsymbol{e}_x+p_y\boldsymbol{e}_y,\quad \boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y,\quad \boldsymbol{J}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=(xp_x-yp_x)\boldsymbol{e}_z$$

Hamilton 函数为 $H=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2)-\frac{m\alpha}{\sqrt{x^2+y^2}}$）

答案：$[A_x,J_z]=-A_y$，　$[A_y,J_z]=A_x$，　$[A_x,H]=0$，　$[A_y,H]=0$.

6.6　找出各向同性三维谐振子的运动积分，其 Lagrange 函数为

$$L=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)-\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2)$$

（提示：（1）Hamilton 函数不显含时间，故能量守恒；（2）在柱坐标中讨论，Hamil-

ton 函数不含 φ，故 p_φ 守恒）

答案：$F_1=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+\frac{1}{2}k(x^2+y^2+z^2)=C_1$；

$F_2=xp_y-yp_x=C_2$； $F_3=yp_z-zp_y=C_3$； $F_4=zp_x-xp_z=C_4$；

$F_5=\frac{1}{2m}p_x^2+\frac{1}{2}kx^2=C_5$； $F_6=\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2}ky^2=C_6$；

$F_7=\frac{1}{2m}p_z^2+\frac{1}{2}kz^2=C_7$； $F_8=[F_2,F_5]=\frac{1}{m}p_xp_y+kxy=C_8$；

$F_9=\frac{1}{m}p_yp_z+kyz=C_9$； $F_{10}=\frac{1}{m}p_xp_z+kxz=C_{10}$.

6.7 证明对称重刚体作定点运动的 Hamilton 函数为

$$H=\frac{p_\vartheta^2}{2I_1}+\frac{(p_\varphi-p_\psi\cos\vartheta)^2}{2I_1\sin^2\vartheta}+\frac{p_\varphi^2}{2I_3}+mgl\cos\vartheta$$

并求三个运动积分.（提示：Hamilton 函数不显含时间 t；Hamilton 函数不含广义坐标 φ 和 ψ，因此可求出三个运动积分）

6.8 一质量为 m 的质点在势场中作一维运动，质点受到正比于其速度的阻力 $-2m\gamma\dot{q}$.（1）证明可由 Lagrange 函数

$$L=\left[\frac{1}{2}m\dot{q}^2-U(q)\right]\exp(2\gamma t)$$

得到运动微分方程；（2）用母函数 $F_3(q,P,t)=qP\exp(\gamma t)$，求正则变换后的 Hamilton 函数 $H^*(Q,P,t)$，对于 $U(q)=m\omega^2q^2/2$，证明变换后的 Hamilton 函数

$$H^*(Q,P,t)=\frac{1}{2m}P^2+\frac{1}{2}m\omega^2Q^2+\gamma QP$$

为运动常量；（3）对于弱阻尼情况 $\gamma<\omega$，由（2）中的运动常量，求阻尼振子的解 $q(t)$.

答案：（1）运动方程为 $m\ddot{q}=-\partial U/\partial q-2m\gamma\dot{q}$；（2）Hamilton 函数为

$$H(p,q,t)=\frac{p^2}{2m}\exp(-2\gamma t)+U(q)\exp(2\gamma t)$$

变换后的新 Hamilton 函数为

$$H^*=\frac{P^2}{2m}+U[Q\exp(-\gamma t)]\exp(2\gamma t)+\gamma QP$$

新 Hamilton 函数不显含时间 t，故是运动积分；（3）积分常数由

$$H^*=\frac{1}{2m}P^2+\frac{1}{2}m\omega^2Q^2+\gamma QP$$

表示.

$$q(t)=\frac{1}{\omega_\gamma}\sqrt{\frac{2H^*}{m}}\exp(-\gamma t)\sin(\omega_\gamma t+\alpha)$$

其中 $\omega_\gamma=\sqrt{\omega^2-\gamma^2}$，$H^*$ 和 α 由初始条件决定.

6.9 证明变换

$$q=\sqrt{\frac{2Q}{k}}\cos P;\quad p=\sqrt{2kQ}\sin P$$

是一个正则变换，并把正则方程

$$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p};\quad \dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}$$

变换成

$$\dot{Q}=\frac{\partial H^*}{\partial P};\quad \dot{P}=-\frac{\partial H^*}{\partial Q}$$

式中 $H=(p^2+k^2q^2)/2$ 和 $H^*=kQ$.

6.10 从 Hamilton 原理式(6.3.27)导出各向同性弹性体的运动方程(3.4.4).

6.11 证明 Jacobi 恒等式(6.2.20).



第二部分

电 动 力 学



第 7 章　电磁场的基本性质

从本章至第 12 章，介绍电动力学的基本内容. 电动力学研究电磁场和电磁波的基本性质、运动规律以及电磁波与各种形态物质的相互作用. 1865 年，Maxwell 总结、修正和推广了前人的工作，建立了作为物质形态的场——电磁场的运动规律的一整套完备理论，并且预言了电磁波的存在. 电磁场的基本规律遵循 Maxwell 方程组，而 Maxwell 方程组建立在电磁实验定律的基础上. 因此，我们首先介绍三个基本的电磁定律，即库仑定律、安培定律和法拉第定律，并导出它们各自的数学方程. 然后讨论如何推广和联系这些数学方程，导出真空和介质中的 Maxwell 方程组，并讨论其性质，包括电磁场的能量、动量和角动量性质.

7.1　电磁现象的实验定律和平方反比律

Coulomb 定律：描写真空中两个静止点电荷 q_1 和 q_2 之间相互作用力的定律：电荷 q_2 受到 q_1 的作用力 $\boldsymbol{F}_{21}$ 由下式表示，如图 7.1.1

$$\boldsymbol{F}_{21}=\frac{q_1q_2}{4\pi\varepsilon_0\,|\,\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1\,|^2}\boldsymbol{e} \qquad (7.1.1a)$$

其中 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 分别是 q_1 和 q_2 的位置矢量

$$\boldsymbol{e}=\frac{\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1}{|\,\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1\,|} \qquad (7.1.1b)$$

是$(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)$方向（即两个电荷的连线方向）上的单位矢量. 同样，电荷 q_1 受到 q_2 的作用力 $\boldsymbol{F}_{12}$ 为

$$\boldsymbol{F}_{12}=-\frac{q_1q_2}{4\pi\varepsilon_0\,|\,\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\,|^2}\boldsymbol{e} \qquad (7.1.2)$$

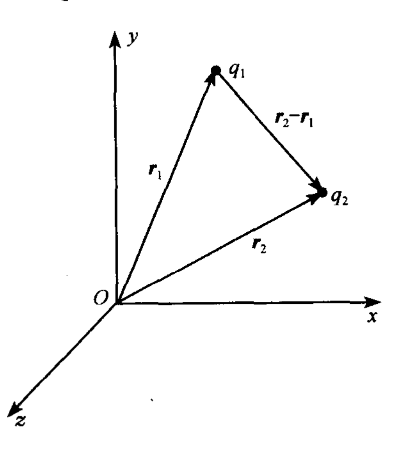


图 7.1.1　库仑定律

显然它们满足牛顿第三定律，即 $\boldsymbol{F}_{12}=-\boldsymbol{F}_{21}$. 库仑定律的平方反比律性质是 Maxwell 方程组的基础，现代实验证明，如果库仑力为$|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|^{-(2+\delta)}$，那么

$$\delta\leqslant(2.7\pm3.1)\times10^{-15}$$

当空间存在 n 个点电荷 $q_i(i=1,2,\cdots,n)$时，实验证明，对任何一个电荷 q_k，受到**其他电荷**的作用力为

$$\boldsymbol{F}_k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq k}^{n}\frac{q_i q_k}{|\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_i|^2}\cdot\frac{\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}_k-\boldsymbol{r}_i|} \tag{7.1.3}$$

上式意味着电荷作用力的**线性叠加原理**,是电磁学中的一个十分重要的原理.正是由于线性叠加原理,真空中的 Maxwell 方程组才是简单的线性方程组.从经典到亚原子范围,还没有一个反例显示线性叠加原理不成立.

式(7.1.3)中用 q 代替 q_k,那么电荷 q 受到其他电荷的作用力可表示成

$$\boldsymbol{F} = q\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) \tag{7.1.4}$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 为 q 的位置矢量,矢量场函数 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$称为**电场强度**

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i=1}^{n}\frac{q_i}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i|^2}\cdot\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i|} \tag{7.1.5}$$

如果"其他电荷"是一个在体积 V 内连续分布的带电体,电荷密度为 $\rho(\boldsymbol{r})$,那么应该有

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\cdot\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{7.1.6}$$

显然 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$可以写成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')\,\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= -\nabla\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \equiv -\nabla\varphi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{7.1.7}$$

注意:(7.1.7)式中∇只对观察点 $\boldsymbol{r}$ 求梯度.标量函数 $\varphi(\boldsymbol{r})$称为**电势**

$$\varphi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{7.1.8}$$

由矢量分析,矢量场的性质由矢量的散度和旋度决定.因此,我们来求 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$的散度和旋度.从(7.1.7)立即可以得到静电场的旋度

$$\nabla\times\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{7.1.9}$$

另一方面,由式(7.1.7)

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= -\nabla\cdot\nabla\varphi(\boldsymbol{r}) = -\nabla^2\varphi(\boldsymbol{r}) \\ &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')\,\nabla^2\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')[-4\pi\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \frac{\rho(\boldsymbol{r})}{\varepsilon_0}\end{aligned} \tag{7.1.10}$$

式中 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$是 Dirac-$\delta$ 函数,即得到静电场的散度

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \frac{\rho(\boldsymbol{r})}{\varepsilon_0} \tag{7.1.11}$$

因此,从式(7.1.9)和(7.1.11)可知:静电场是有源无旋场,电场线不闭合,从正电荷出发到负电荷终止,有头有尾.

例 7.1.1　求电偶极子的场分布.

解：　电偶极子定义为

$$\boldsymbol{p}=\lim_{\substack{l\to 0\\ q\to\infty}} \boldsymbol{l}q \tag{7.1.12}$$

其中 $\boldsymbol{l}$ 是由负电荷指向正电荷的矢量. 设场点 P 的球坐标为(r,ϑ,φ)，电势为

$$\begin{aligned}\varphi(r,\vartheta)&=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_+}-\frac{1}{r_-}\right)\\&=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{r_--r_+}{r_+r_-}\approx\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{l\cos\vartheta}{r^2}\\&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{r^3}=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\boldsymbol{p}\cdot\nabla\frac{1}{r}\end{aligned} \tag{7.1.13}$$

因此，当$|\boldsymbol{r}|\gg l$，电场强度为

$$\boldsymbol{E}(r,\vartheta)=-\nabla\varphi(r,\vartheta)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}-\boldsymbol{p}r^2}{r^5} \tag{7.1.14}$$

在球坐标下，若 $\boldsymbol{p}$ 的方向与 z 轴一致(如图 7.1.2)，电场可表示为

$$\boldsymbol{E}(r,\vartheta)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{p}{r^3}(2\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r+\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta) \tag{7.1.15}$$

图 7.1.2　z 方向的电偶极子

安培定律：描写真空中两个电流元 $\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}\tau_2$ 之间相互作用力的定律，$\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}\tau_2$ 受到 $\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1$ 的作用力 $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{21}$ 由下式表示

$$\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{21}=\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}\tau_2\times[\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1\times(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)]}{|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|^3} \tag{7.1.16}$$

而 $\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1$ 受到 $\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}\tau_2$ 的作用力 $\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{12}$ 为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{F}_{12}=\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1\times[\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}\tau_2\times(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)]}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|^3} \tag{7.1.17}$$

可见，电流元之间的相互作用力也服从平方反比律. 但不满足牛顿第三定律，这是因为不可能存在稳定的电流元，实验中电流总是闭合回路. 对电流分别为 I_1 和 I_2 的闭合回路，假定线性叠加原理仍然成立，那么相互作用力为

$$\boldsymbol{F}_{12}=\frac{\mu_0 I_1 I_2}{4\pi}\oint_{l_1}\oint_{l_2}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}_1\times[\mathrm{d}\boldsymbol{l}_2\times(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)]}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|^3} \tag{7.1.18}$$

可以证明两个闭合回路之间的相互作用力满足牛顿第三定律. 类似于方程(7.1.4)，把作用于电流元 $\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1$ 的力写成

$$\mathrm{d}\boldsymbol{F}_1=\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}\tau_1\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) \tag{7.1.19}$$

其中矢量函数 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ 为

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=\frac{\mu_0}{4\pi}\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}\tau_2\times\frac{(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_2)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_2|^3} \tag{7.1.20}$$

由线性叠加原理，对空间 V 内分布的电流元 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$，$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ 的一般表达式为

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{7.1.21}$$

由于历史的原因，矢量 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ 称为**磁感应强度**. 对稳恒电流为 I 的闭合回路 l

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})=\frac{\mu_0 I}{4\pi}\oint_l\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}'\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3} \tag{7.1.22}$$

同电场强度一样，我们来讨论磁感应强度的散度和旋度，由式(7.1.21)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})&=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\left(\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\&=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\left[\nabla\times\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}-\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\nabla\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\&=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\nabla\times\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\nabla\times\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\&\equiv\nabla\times\boldsymbol{A}\end{aligned} \tag{7.1.23}$$

注意：(7.1.23)式中∇只对观察点 $\boldsymbol{r}$ 求梯度，矢量 $\boldsymbol{A}$ 称为**矢量势**，定义为

$$\boldsymbol{A}=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{7.1.24}$$

显然，对于稳恒电流为 I 的闭合回路 $\boldsymbol{l}$

$$\boldsymbol{A}=\frac{\mu_0 I}{4\pi}\int_l\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{7.1.25}$$

由矢量分析，立即可以得到磁感应强度的散度

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0 \tag{7.1.26}$$

另一方面，由式(7.1.23)

$$\nabla\times\boldsymbol{B}=\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A}=\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})-\nabla^2\boldsymbol{A} \tag{7.1.27}$$

首先分析上式第一项，由 $\boldsymbol{A}$ 的定义

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{A}&=\frac{\mu_0}{4\pi}\nabla\cdot\int_V\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\&=-\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=-\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\nabla'\cdot\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\&\quad+\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\nabla'\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned}$$

由电荷守恒定律

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \tag{7.1.28}$$

对稳恒电流 $\partial\rho/\partial t=0$，即稳恒电流条件为$\nabla' \cdot \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')=0$，于是

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = -\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \nabla' \cdot \frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = -\frac{\mu_0}{4\pi}\oint_S \frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}' \tag{7.1.29}$$

当电流分布在有限空间时，上式中积分面可取足够大的球面，在球面上电流密度为零，于是积分为零，即$\nabla \cdot \boldsymbol{A}=0$；再看式(7.1.27)的第二项

$$\nabla^2\boldsymbol{A} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \nabla^2 \frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\cdot\nabla^2\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$= \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')[-4\pi\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = -\mu_0\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{7.1.30}$$

因此得到磁感应强度的旋度为

$$\nabla \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \mu_0\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{7.1.31}$$

方程(7.1.26)和(7.1.31)即为静磁场的基本方程，可见：①磁场是无源有旋场，磁场线是闭合的，没有起点也没有终点，无头无尾；②磁场是非保守场，电流激发的磁场以涡旋形式出现，与静电场完全不同. 注意：稳定电流激发的磁场的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 满足方程

$$\begin{aligned} \nabla^2\boldsymbol{A} &= -\mu_0\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \\ \nabla \cdot \boldsymbol{A} &= 0 \end{aligned} \tag{7.1.32}$$

例 7.1.2　求磁偶极子的场分布.

解：　磁偶极子定义为

$$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{n}\lim_{\substack{S\to 0\\ I\to\infty}} SI \tag{7.1.33}$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 是电流回路面 S 的法向(由右手定则决定)，I 是回路中的电流. 矢量势 $\boldsymbol{A}$ 为

$$\boldsymbol{A} = \frac{\mu_0 I}{4\pi}\oint_l \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{7.1.34}$$

由矢量分析公式

$$\oint_l u\,\mathrm{d}\boldsymbol{l}' = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}' \times \nabla' u \tag{7.1.35}$$

矢量势 $\boldsymbol{A}$ 可写成

$$\boldsymbol{A} = \frac{\mu_0 I}{4\pi}\int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}' \times \nabla' \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_S I\,\mathrm{d}\boldsymbol{S}' \times \frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3} \tag{7.1.36}$$

当$|\boldsymbol{r}| \gg |\boldsymbol{r}'|$，上式近似为

$$\boldsymbol{A} \approx \frac{\mu_0}{4\pi}\int_S I\,\mathrm{d}\boldsymbol{S}' \times \frac{\boldsymbol{r}}{r^3} = \frac{\mu_0}{4\pi}\boldsymbol{m} \times \frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{7.1.37}$$

其中 $\boldsymbol{m}$ 为

$$\boldsymbol{m}=\int_S I\,\mathrm{d}\boldsymbol{S}'=\boldsymbol{n}IS \tag{7.1.38}$$

于是我们得到磁偶极子的场

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}&=\nabla\times\boldsymbol{A}=\frac{\mu_0}{4\pi}\nabla\times\left(\boldsymbol{m}\times\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right)\\&=\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}-\boldsymbol{m}r^2}{r^5}\end{aligned} \tag{7.1.39}$$

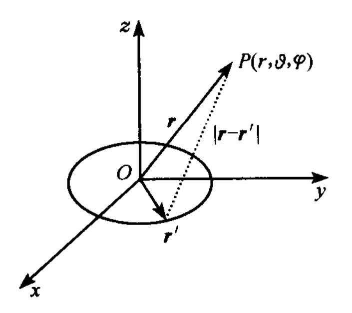


图 7.1.3 z 方向的磁偶极子

若取 $\boldsymbol{m}$ 的方向与 z 轴一致(如图 7.1.3),可得到球坐标中的 $\boldsymbol{B}$ 为

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{m}{r^3}(2\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r+\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta) \tag{7.1.40}$$

与例 7.1.1 中电偶极子的场相比,二者有相似的形式. 图 7.1.4 画出了电偶子(上)和磁偶极子(下)的场线分布,图中曲线的切向即为场(电场或者磁场)的方向. 注意:在电偶极子的连线上,电场由正电荷指向负电荷,与 $\boldsymbol{p}$ 的方向相反;而在磁偶极子内(即小线圈的中间),磁场方向与 $\boldsymbol{m}$ 一致.

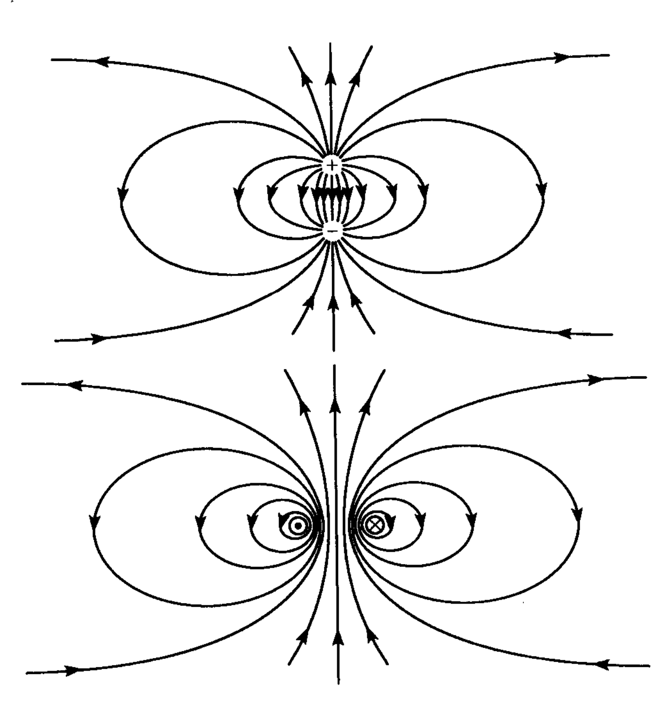


图 7.1.4 电偶极子(上)和磁偶极子(下)的场线

电力线和磁力线：图 7.1.4 中曲线的切向即为场（电场或者磁场，下面以电场为例）的方向，则曲线线元 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}=(\mathrm{d}x,\mathrm{d}y,\mathrm{d}z)$ 与 $\boldsymbol{E}$ 方向平行，故 $\boldsymbol{E}\times\mathrm{d}\boldsymbol{r}=0$. 展开后得到分量形式

$$\frac{\mathrm{d}x}{E_x}=\frac{\mathrm{d}y}{E_y}=\frac{\mathrm{d}z}{E_z} \tag{7.1.41a}$$

上式即是决定电力线的方程；对磁力线，只要把上式中的电场改成磁场即可. 在球坐标内，$\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\mathrm{d}r\boldsymbol{e}_r+r\mathrm{d}\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta+r\sin\vartheta\mathrm{d}\varphi\boldsymbol{e}_\varphi$，故上式变成

$$\frac{\mathrm{d}r}{r\sin\vartheta E_r}=\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\sin\vartheta E_\vartheta}=\frac{\mathrm{d}\varphi}{E_\varphi} \tag{7.1.41b}$$

结合式(7.1.41b)与式(7.1.15)或者式(7.1.40)，可以得到 z 方向偶极子的电力线或磁力线的方程

$$\frac{\mathrm{d}r}{2r\cos\vartheta}=\frac{\mathrm{d}\vartheta}{\sin\vartheta} \tag{7.1.41c}$$

上式积分得到：$r=r_0\sin^2\vartheta$，其中 r_0 为积分常数. 注意：图 7.1.4 的力线分别是两个点电荷($\pm q$)(上)的电力线和小线圈(下)的磁力线，与图 7.1.2 和图 7.1.3 对应.

Faraday 电磁感应定律：1831 年 Faraday 在实验中发现，把电路放到随时间变化的磁场中时，电路中会产生感生电流，产生感生电流的感生电动势 $\mathscr{E}$ 的大小与通过回路的磁通量的变化成正比，即

$$\mathscr{E}=-\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t}=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iint_S\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.42a}$$

上式负号表示感应电流的磁场阻碍磁通量的变化，S 是以回路 C 为边界的任意曲面，如图 7.1.5. 另一方面，感生电动势等于感生电场的积分

$$\mathscr{E}=\oint_C\boldsymbol{E}'\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{7.1.42b}$$

因此

$$\oint_C\boldsymbol{E}'\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iint_S\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.43}$$

下面分两种情况讨论上式.

1. 在相对于回路静止的坐标系观察：上式右边的全导数仅对 $\boldsymbol{B}$ 求偏导

$$\oint_C\boldsymbol{E}'\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=-\iint_S\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.44}$$

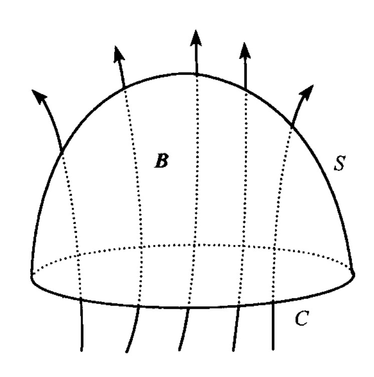


图 7.1.5　S 是以回路 C 为边界的任意曲面

磁场 $\boldsymbol{B}$ 是在实验室坐标系中测量的，感生电场 $\boldsymbol{E}'$ 是在回路 C 中测量的，现在观察者(即实验室坐标)相对于回路 C 静止，因此，$\boldsymbol{E}'$ 就是实验室测量的电场 $\boldsymbol{E}$，即 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}'$. 上述方程即为 Faraday 电磁感应定律的积分形式

$$\oint_C \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = -\iint_S \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.45}$$

2. 在相对于回路运动的坐标系观察：设回路 C 以低速 $v(v \ll c)$ 作平移运动，方程(7.1.43)右边的全导数为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \tag{7.1.46}$$

因此

$$\oint_C \boldsymbol{E}' \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = -\iint_S \left[\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{B}\right] \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.47}$$

利用$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$ 以及$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0$，上式可写成

$$\begin{aligned}
\oint_C \boldsymbol{E}' \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} &= -\iint_S \left[\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} + \nabla \times (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v})\right] \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \\
&= -\left[\iint_S \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \iint_S \nabla \times (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}\right] \\
&= -\iint_S \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \oint_C (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}
\end{aligned}$$

即

$$\oint_C (\boldsymbol{E}' - \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = -\iint_S \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.48}$$

令 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}' - \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}$，得到

$$\oint_C \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = -\iint_S \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.1.49}$$

上式与方程(7.1.45)完全相同. 注意：$\boldsymbol{E}$ 是相对于回路运动的实验室坐标系测量到的电场，而 $\boldsymbol{E}'$ 是相对于回路静止的坐标系测量到的电场，两者的变换关系为

$$\boldsymbol{E}' = \boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{7.1.50}$$

该式只在低速时成立，对高速运动，须用狭义相对论变换关系

$$\boldsymbol{E}' = \frac{(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \tag{7.1.51}$$

我们将在后面讨论. 由于回路 C 的任意性，利用斯托克斯公式，可以得到 Faraday 电磁感应定律的微分形式

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{7.1.52}$$

因此随时间变化的磁场可以激发涡旋电场，这与静电场方程$\nabla \times \boldsymbol{E} = 0$ 是不同的.

7.2 真空中电磁场的 Maxwell 方程组和位移电流

至此，我们得到了电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的五个方程，它们是

静电场方程

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=0;\quad \varepsilon_0\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\rho \tag{7.2.1}$$

静磁场方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{j} \tag{7.2.2}$$

变化磁场产生电场的方程

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{7.2.3}$$

这五个方程都在电磁实验基础上总结出来的，有它们的使用条件和范围. 问题是：能否从这五个方程总结出更普遍的电磁规律呢？特别是 Faraday 电磁感应定律，随时间变化的磁场能够激发涡旋的电场，反过来，随时间变化的电场能否激发出磁场呢？

以上五个方程能否推广到时间变化情况呢？我们来具体分析这五个方程.

显然，方程$\nabla\times\boldsymbol{E}=0$ 可有方程(7.2.3)代替，推广到时间变化的电磁场问题不大；方程$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$ 是由稳恒电流总结出来的，能否推广到时间变化的电磁场问题？由方程(7.2.3)，两边求散度

$$\nabla\cdot(\nabla\times\boldsymbol{E})=-\nabla\cdot\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\boldsymbol{B} \tag{7.2.4}$$

但$\nabla\cdot(\nabla\times\boldsymbol{E})\equiv 0$，因此$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=$常数，如果取这个常数为零，并不影响 Faraday 电磁感应定律，故我们认为方程$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$ 是普遍成立的；方程$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{j}$ 也是从稳恒电流总结出来的，推导它时，用到了稳恒电流条件$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$. 方程$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{j}$ 两边求散度，得到$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$ 的结论，显然如果把方程$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{j}$ 推广到时间变化情况，它与电荷守恒定律矛盾！ Maxwell 首先看到了这个矛盾，并从理论上解决了这个矛盾. 由电荷守恒定律式(7.1.28)并承认方程 $\varepsilon_0\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\rho$ 的普遍性，得到

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=\nabla\cdot\left(\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}+\boldsymbol{j}\right)=0 \tag{7.2.5}$$

可见，只要用 $\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\partial\boldsymbol{E}/\partial t$ 来代替 $\boldsymbol{j}$，方程(7.2.2)的第二式就与电荷守恒定律不矛盾了！ 因此我们得到方程

$$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\left(\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right) \tag{7.2.6}$$

式中 $\varepsilon_0\partial\boldsymbol{E}/\partial t$ 称为**位移电流**. 位移电流的引入是 Maxwell 对电磁理论最杰出的贡献. 当 $\boldsymbol{j}=0$ 时

$$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} \tag{7.2.7}$$

上式与 Faraday 电磁感应定律相对应，说明随时间变化的电场也激发涡旋磁场.

根据以上分析，我们得到了一组描述真空中随时间变化的电磁场方程组

$$\varepsilon_0\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\rho;\quad \nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{7.2.8}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\left(\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right)\tag{7.2.9}$$

这就是**真空中的 Maxwell 方程组**. $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 有 6 个未知分量，而 Maxwell 方程组有 8 个方程，看起来是超定的. 事实上，这 8 个方程不是完全独立的，其中有 4 个是齐次方程. 从 $\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$，知道 $\boldsymbol{B}$ 一定是某个矢量势 $\boldsymbol{A}$ 的旋度(与静态场类似)，即 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$；而由方程(7.2.8)的第二式得到

$$\nabla\times\left(\boldsymbol{E}+\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)=0\tag{7.2.10}$$

知道 $E+\partial\boldsymbol{A}/\partial t$ 一定是某个标量势的梯度

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\varphi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\tag{7.2.11}$$

因此电磁场由 4 个势函数描述，方程(7.2.8)的第一式和方程(7.2.9)的第二式恰好是 4 个方程. 因此 Maxwell 方程组是自洽的.

不难证明 Maxwell 方程组的解是唯一的. 证明：设给定源分布 ρ 和 $\boldsymbol{j}$ 的电磁体系存在不同的两组解 $(\boldsymbol{E},\boldsymbol{B})$ 和 $(\boldsymbol{E}',\boldsymbol{B}')$. $(\boldsymbol{E},\boldsymbol{B})$ 满足方程组(7.2.8)和(7.2.9)，而 $(\boldsymbol{E}',\boldsymbol{B}')$ 也满足

$$\varepsilon_0\nabla\cdot\boldsymbol{E}'=\rho;\quad \nabla\times\boldsymbol{E}'=-\frac{\partial\boldsymbol{B}'}{\partial t}\tag{7.2.12}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}'=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}'=\mu_0\left(\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}'}{\partial t}\right)\tag{7.2.13}$$

并且它们满足同样的初始条件

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},0)=\boldsymbol{E}'(\boldsymbol{r},0);\quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},0)=\boldsymbol{B}'(\boldsymbol{r},0)\tag{7.2.14}$$

和边界条件

$$\boldsymbol{E}\mid_{\partial D}=\boldsymbol{E}'\mid_{\partial D};\quad \boldsymbol{B}\mid_{\partial D}=\boldsymbol{B}'\mid_{\partial D}\tag{7.2.15}$$

令 $\boldsymbol{E}''=\boldsymbol{E}-\boldsymbol{E}'$ 和 $\boldsymbol{B}''=\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}'$，方程(7.2.8)、(7.2.9)减去方程(7.2.12)、(7.2.13)相应的方程得到

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}''=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{E}''=-\frac{\partial\boldsymbol{B}''}{\partial t}\tag{7.2.16}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}''=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}''=\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}''}{\partial t}\tag{7.2.17}$$

初始条件和边界条件变为

$$\boldsymbol{E}''(\boldsymbol{r},0)=0;\quad \boldsymbol{B}''(\boldsymbol{r},0)=0\tag{7.2.18}$$

$$\boldsymbol{E}''\mid_{\partial D}=0;\quad \boldsymbol{B}''\mid_{\partial D}=0\tag{7.2.19}$$

因此 $\boldsymbol{E}''$ 和 $\boldsymbol{B}''$ 满足无源、零初值和零边值定解问题. 作积分(7.4 节表明这实际上是电磁场的能量)

$$W=\frac{1}{2}\int_D\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}''\cdot\boldsymbol{E}''+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}''\cdot\boldsymbol{B}''\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\tag{7.2.20}$$

假定体系的边界不变化,显然

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mu_0}\int_D[\boldsymbol{E}''\cdot(\nabla\times\boldsymbol{B}')-\boldsymbol{B}'\cdot(\nabla\times\boldsymbol{E}'')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=-\frac{1}{\mu_0}\int_D\nabla\cdot(\boldsymbol{E}''\times\boldsymbol{B}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=-\frac{1}{\mu_0}\iint_{\partial D}(\boldsymbol{E}''\times\boldsymbol{B}')\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S \quad (7.2.21)$$

在边界上 $\boldsymbol{E}''|_{\partial D}=0$;$\boldsymbol{B}''|_{\partial D}=0$,$W$=常数,即

$$W=\int_D\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}''\cdot\boldsymbol{E}''+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}'\cdot\boldsymbol{B}'\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=C\quad(C\text{ 为常数})\quad (7.2.22)$$

由初始条件 $\boldsymbol{E}''(\boldsymbol{r},0)=0$ 和 $\boldsymbol{B}''(\boldsymbol{r},0)=0$,得到 $C=0$,故 $\boldsymbol{E}''\equiv0$ 和 $\boldsymbol{B}''\equiv0$. 于是唯一性得证.

7.3 介质中电磁场的 Maxwell 方程组和边界方程

当空间存在介质时,上述 Maxwell 方程组是否仍然成立呢? 从微观的角度看,介质的存在相当于真空中存在大量的带电粒子,本质上 Maxwell 方程组仍然成立. 但宏观的电动力学不是去考察个别带电粒子的微观场,而是考察它们的宏观平均. 介质在宏观电磁场的作用下,内部带电粒子的分布要发生变化,于是就有可能出现介质的电荷不平衡,即出现宏观的附加电荷和电流. 这些附加的电荷和电流也要激发电磁场,使原来的宏观电磁场有所改变.

在存在电场的情况下,介质中的正负电荷分别受到方向相反力的作用,因此正负电荷间的距离拉开了. 从宏观来看,相当于产生了一个电偶极子,这种现象称为**介质的极化**,引进极化强度 $\boldsymbol{P}$ 来描述,单位体积的电偶极子为

$$\boldsymbol{P}=\lim_{\Delta V\to0}\frac{\sum_i\boldsymbol{p}_i}{\Delta V}\quad (7.3.1)$$

其中 $\boldsymbol{p}_i$ 是每个分子的电偶极矩,求和对体积 ΔV 中所有电偶极子进行. $\boldsymbol{P}$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的函数,反映了介质中各处的极化强度. 在小体积 $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$ 内总的电偶极子为 $\mathrm{d}\boldsymbol{p}=\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$,故体积 V 内介质的总电偶极子为

$$\boldsymbol{p}=\int_V\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\quad (7.3.2)$$

根据例 7.1.1 的结果,由式(7.1.13),总电偶极子在空间某点产生的电势为

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')\cdot\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\left[\nabla'\cdot\left(\frac{\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)-\frac{\nabla'\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\oiint_S \frac{\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V \frac{\nabla'\cdot \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{7.3.3}$$

分析上式:第一项为面电荷产生的场,这是由于极化在 S 面上产生的极化面电荷;第二项为体电荷产生的场,这是由于极化在 V 内产生的极化体电荷. 因此极化面电荷和极化体电荷密度分别为

$$\sigma_{\mathrm{p}} = \boldsymbol{P}\cdot \boldsymbol{n};\quad \rho_{\mathrm{p}} = -\nabla\cdot \boldsymbol{P} \tag{7.3.4}$$

当电场随时间变化时,极化过程中正负电荷的相对位移也将随时间变化,由此产生的电流称为**极化电流**. 极化电荷与极化电流也应该满足连续性方程

$$\nabla\cdot \boldsymbol{j}_{\mathrm{p}} = -\frac{\partial \rho_{\mathrm{p}}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot \boldsymbol{P} = \nabla\cdot \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t} \tag{7.3.5}$$

因此

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{p}} = \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t} \tag{7.3.6}$$

由于物质由原子、分子组成,原子、分子中运动的电子和核子都可以看成磁偶极子. 用宏观方式描述,则可以将磁介质中原子、分子看成一个个小环形电流,称为**分子电流**,它们具有磁矩,一般顺磁介质中的分子电流相互抵消,介质不显示宏观磁性,当施加外磁场时则发生磁化. 物质磁化的强度用磁化强度矢量 $\boldsymbol{M}$ 来表示

$$\boldsymbol{M} = \lim_{\Delta V\to 0}\frac{\sum\limits_i \boldsymbol{m}_i}{\Delta V} \tag{7.3.7}$$

其中 $\boldsymbol{m}_i$ 是每个分子的磁矩,求和对体积 ΔV 中所有磁偶极子进行. $\boldsymbol{M}$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的函数,所以 $\boldsymbol{M}$ 反映了介质中各处的磁化强度. 在小体积 $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$ 内总的磁偶极子为 $\mathrm{d}\boldsymbol{m}=\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$,故体积 V 内介质的总的磁偶极子为

$$\boldsymbol{m} = \int_V \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.3.8}$$

根据例 7.1.2 的结果,由式(7.1.37),总磁偶极子在空间某点产生的矢量势为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) &= \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \frac{\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}')\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}')\times\left(\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \left[-\nabla'\times\left(\frac{\boldsymbol{M}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right) + \frac{\nabla'\times\boldsymbol{M}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned} \tag{7.3.9}$$

利用等式

$$\int_V \nabla'\times\left(\frac{\boldsymbol{M}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \oiint_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}'\times\left(\frac{\boldsymbol{M}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right) = \oiint_S \frac{\boldsymbol{n}'\times\boldsymbol{M}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}S' \tag{7.3.10}$$

方程(7.3.9)可以写成

$$A = \frac{\mu_0}{4\pi}\oint_S \frac{M \times n'}{|r - r'|}dS' + \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \frac{\nabla' \times M}{|r - r'|}d^3 r' \qquad (7.3.11)$$

分析上式：第一项为磁化面电流产生的场；而第二项为磁化体电流产生的场. 因此磁化面电流和磁化体电流密度分别为

$$k_m = M \times n; \quad j_m = \nabla \times M \qquad (7.3.12)$$

显然$\nabla \cdot j_m = 0$，说明磁化电流不引起电荷的积累.

当存在介质时，Maxwell 方程(7.2.8)和(7.2.9)中的电荷密度和电流密度应该为

$$\rho_t = \rho - \nabla \cdot P; \quad j_t = j + \frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \times M \qquad (7.3.13)$$

于是 Maxwell 组方程修正为

$$\nabla \cdot E = \frac{1}{\varepsilon_0}(\rho - \nabla \cdot P); \quad \nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \qquad (7.3.14)$$

$$\nabla \cdot B = 0; \quad \nabla \times B = \mu_0\left(j + \frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \times M + \varepsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t}\right) \qquad (7.3.15)$$

若定义

$$D = \varepsilon_0 E + P; \quad H = \frac{1}{\mu_0}B - M \qquad (7.3.16)$$

我们得到介质中的 Maxwell 方程组

$$\nabla \cdot D = \rho; \quad \nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \qquad (7.3.17)$$

$$\nabla \cdot B = 0; \quad \nabla \times H = j + \frac{\partial D}{\partial t} \qquad (7.3.18)$$

其中新引入的辅助矢量 D 称为**电位移矢量**，H 称为**磁场强度**，它们是导入量，目的是使 Maxwell 方程只出现自由电荷和自由电流. 注意：对静场问题，由式(7.3.15)和(7.3.18)，B 由传导电流和极化电流产生，而 H 仅与传导电流有关，而传导电流在实验中可直接测量，也就是 H 可直接测量，故在存在磁介质情况，H 更有意义.

显然，介质中的 Maxwell 方程组中有 4 个矢量，12 个分量，而方程至多只有 8 个，因此这 4 个矢量一定不是独立的. 一般 D、H 是 E、B 的函数，它们的函数关系视各种介质而定，常用经验规律来表示. 这些函数称为介质电磁性质的**本构关系**. 在场不是很强的情况下，大多数物质对场的反应是线性的，特别是在各向同性的物质内，线性关系可以写成比例关系

$$D = \varepsilon E; \quad B = \mu H; \quad P = \chi\varepsilon_0 E; \quad M = \kappa H \qquad (7.3.19)$$

其中比例常数 ε 和 μ 分别称为介质的**介电常数**和**磁导率**，χ 和 κ 分别称为**电极化率**和**磁极化率**，显然它们存在关系

$$\chi = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} - 1 \equiv \varepsilon_r - 1; \quad \kappa = \frac{\mu}{\mu_0} - 1 \equiv \mu_r - 1$$

式中 ε_r 和 μ_r 分别称为**相对介电常数**和**相对磁导率**，$n=\sqrt{\varepsilon_r\mu_r}$为**折射率**. 如果介质是各向异性的，方程(7.3.19)中的诸比例系数须要用张量来表示.

边界条件：在不同介质的交界面上，电磁场量又如何变化呢？显然微分形式的 Maxwell 方程组(7.3.17)和(7.3.18)已不成立. 但利用矢量分析的定理，微分形式的 Maxwell 方程组可以写成积分形式

$$\oint_S \boldsymbol{D}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = Q_f;\quad \oint_S \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = 0 \tag{7.3.20}$$

$$\oint_L \boldsymbol{E}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = -\oint_S \frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S};\quad \oint_L \boldsymbol{H}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \oint_S\left(\boldsymbol{j}+\frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t}\right)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.3.21}$$

注意：方程(7.3.20)的面积分是在空间某闭合曲面 S 上进行，$\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 是其面积元；而方程(7.3.21)的面积分，曲面 S 是以空间某闭合曲线 L 为底边所张的任意曲面，它是不闭合的. 在介质的分界面上取高度为 h 的小盒子(如图 7.3.1)，在这个小盒子上积分，方程(7.3.20)第一式为

$$\oint_S \boldsymbol{D}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = (D_{2n}-D_{1n})\Delta S = \sigma_f \Delta S \tag{7.3.22}$$

当 $h\to 0$，可以忽略侧面积分的贡献，故我们得到 $\boldsymbol{D}$ 的边界条件

$$(\boldsymbol{D}_2-\boldsymbol{D}_1)\cdot \boldsymbol{n} = \sigma_f \tag{7.3.23}$$

其中 σ_f 为**面电荷密度**. 同理对 $\boldsymbol{B}$ 有

$$(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)\cdot \boldsymbol{n} = 0 \tag{7.3.24}$$

(7.3.23)和(7.3.24)式说明：磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的法向连续，而电位移矢量 $\boldsymbol{D}$ 的法向一般不连续，除非界面上自由电荷密度为零. 对具有线积分的另外二个方程，取跨过分界面的狭长矩形(如图 7.3.2，矩形长边为 Δl，短边为 h)积分回路，在回路积分

$$\oint_L \boldsymbol{E}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = (\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)\cdot \boldsymbol{t}\Delta l = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}\cdot \Delta \boldsymbol{S}$$

式中 $\boldsymbol{t}$ 是回路的切向单位矢量，当矩形的短边 $h\to 0$ 时，回路面积 $\Delta S=h\Delta l\to 0$，因此上式变成

$$(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)\cdot \boldsymbol{t} = 0 \tag{7.3.25}$$

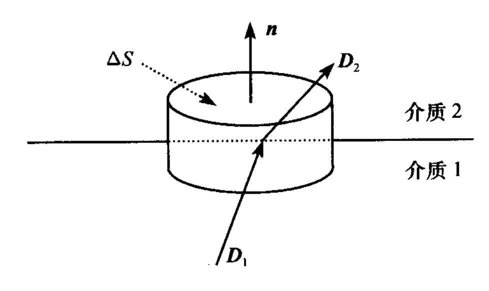


图 7.3.1　在分界面上取高度为 h、面积为 ΔS 的小盒子

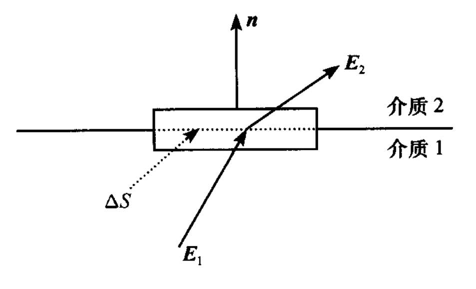


图 7.3.2　在分界面上取狭长矩形回路，面积为 $\Delta S=h\Delta l$

注意到在分界面上，回路的切向可任取，故写成更一般的形式

$$(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)\times\boldsymbol{n}=0 \tag{7.3.26}$$

对磁场 $\boldsymbol{H}$，方程(7.3.21)第二式右边第一项积分表示穿过矩形回路面的总电流，即

$$\oint_S \boldsymbol{j}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{j}\cdot \boldsymbol{e}h\Delta l=\boldsymbol{k}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{e}\Delta l \tag{7.3.27}$$

其中 $\boldsymbol{k}_{\mathrm{f}}=h\boldsymbol{j}$ 为面电流密度，$\boldsymbol{e}$ 是矩形回路面的法向. 因此

$$(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\cdot\boldsymbol{t}=\boldsymbol{k}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{e} \tag{7.3.28}$$

而

$$(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\cdot\boldsymbol{t}=(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{e})=[(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\times\boldsymbol{n}]\cdot\boldsymbol{e}=\boldsymbol{k}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{e}$$

由 $\boldsymbol{e}$ 的任意性，我们有

$$(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}_{\mathrm{f}} \tag{7.3.29}$$

可见电场 $\boldsymbol{E}$ 的切向连续，而磁场 $\boldsymbol{H}$ 的切向一般不连续，除非面电流密度为零.

注意：四个边界条件方程(7.3.23)、(7.3.24)、(7.3.26)和(7.3.29)不是独立的，只要取其中二个就可以了，但必须保证一个是电场的边界条件，另一个是磁场边界条件，如取方程(7.3.23)与(7.3.24)，或者取方程(7.3.26)与(7.3.29). 但对静电场(或者静磁场)边值问题，必须同时取两个电场(或者磁场)边界方程(见第 8 章讨论). 另外，我们在推导边界条件时，假定分界面是平面. 事实上，四个边界条件方程对任意曲面都成立.

7.4　电磁场的守恒定律和场的能量密度

本节主要介绍电磁场的能量守恒、动量守恒和角动量守恒定律.

由方程(7.1.4)和(7.1.19)，静电场 $\boldsymbol{E}$ 对静止电荷，以及静磁场 $\boldsymbol{B}$ 对稳定电流的作用力密度分别为

$$\boldsymbol{f}_{\mathrm{e}}=\rho\boldsymbol{E};\quad \boldsymbol{f}_{\mathrm{m}}=\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{B} \tag{7.4.1}$$

那么当 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 随时间变化时，(7.4.1)式是否成立？Lorentz 把上述力密度表达式推广到一般情况，即在任何情况下，只要电荷和电流同时存在，则电磁场对带电体系的作用力密度为

$$\boldsymbol{f}=\rho\boldsymbol{E}+\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{B} \tag{7.4.2}$$

称为 **Lorentz 力**公式. 如果电流由带电体的运动而产生，即 $\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}$，由于磁场产生的力与运动速度方向垂直，磁场对带电体不做功，所以只要考虑电场对带电体做的功就可以了. 设带电体的电荷密度为 ρ，运动速度为 $\boldsymbol{v}$，它在 $\mathrm{d}t$ 时间内移动的距离为 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}=\boldsymbol{v}\mathrm{d}t$，那么电场做的功为

$$\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}t=\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}t \tag{7.4.3}$$

因此单位时间内电场对空间某区域内的电流所做的功，即带电体机械能 W_{m} 的变

化为

$$\frac{\mathrm{d}W_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}=\int_V \boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.4}$$

另一方面,由真空中的 Maxwell 方程组

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{\mu_0}\nabla\times\boldsymbol{B}-\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t};\quad -\frac{1}{\mu_0}\left[\nabla\times\boldsymbol{E}+\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\right]\cdot\boldsymbol{B}=0$$

于是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{j}&=\frac{1}{\mu_0}(\nabla\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{E}-\frac{\varepsilon_0}{2}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{E}^2\\&=\frac{1}{\mu_0}[(\nabla\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{E}-(\nabla\times\boldsymbol{E})\cdot\boldsymbol{B}]-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right)\\&=-\frac{1}{\mu_0}\nabla\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right)\end{aligned} \tag{7.4.5}$$

令

$$\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}=\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B} \tag{7.4.6}$$

于是方程(7.4.4)可以写成

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}W_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}&=-\frac{1}{\mu_0}\int\nabla\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}-\frac{1}{2}\int\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&=-\oint\!\!\!\oint_S\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{7.4.7}$$

即

$$-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{\mathrm{d}W_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}+\oint\!\!\!\oint_S\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.4.8}$$

分析上式,显然左边积分表示体积 V 内电磁场能量的变化率,因此电磁场的能量密度定义为

$$w=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right) \tag{7.4.9}$$

而右边第二项表示穿过曲面 S 的能量,因此 $\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}$ 为电磁场的能量密度流,称为**坡印廷矢量**.

方程(7.4.8)表明:体积 V 内电磁场能量的减少率等于电磁场对带电体做的机械功率和从曲面上单位时间内流出去的能量之和. 这一结论称为**电磁场的能量守恒定律**. 也可写成微分形式

$$\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{j}=-\nabla\cdot\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}-\frac{\partial w}{\partial t} \tag{7.4.10}$$

电磁场不仅有能量,而且具有表征物质普遍属性的动量和角动量. 在 Lorentz 力的作用下,带电体的机械动量 $\boldsymbol{P}_{\mathrm{m}}$ 的变化为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}=\int_V \boldsymbol{f}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_V(\rho\boldsymbol{E}+\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{B})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.11}$$

利用 Maxwell 方程组，消去上式中的电荷与电流密度，即

$$\boldsymbol{f}=\varepsilon_0(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{E}+\frac{1}{\mu_0}\left(\nabla\times\boldsymbol{B}-\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right)\times\boldsymbol{B} \tag{7.4.12}$$

另一方面，由 Maxwell 方程组可以构成恒等式

$$\frac{1}{\mu_0}(\nabla\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{B}+\varepsilon_0\left(\nabla\times\boldsymbol{E}+\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\right)\times\boldsymbol{E}\equiv 0 \tag{7.4.13}$$

上式与方程(7.4.12)相加得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}=&\ \varepsilon_0[(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{E}+(\nabla\times\boldsymbol{E})\times\boldsymbol{E}]\\&+\frac{1}{\mu_0}[(\nabla\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{B}+(\nabla\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{B}]-\varepsilon_0\frac{\partial(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})}{\partial t}\end{aligned} \tag{7.4.14}$$

进行如下矢量运算

$$\begin{aligned}(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{E}+(\nabla\times\boldsymbol{E})\times\boldsymbol{E}&=(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{E}-\left[\frac{1}{2}\nabla(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{E})-(\boldsymbol{E}\cdot\nabla)\boldsymbol{E}\right]\\&=\nabla\cdot(\boldsymbol{EE})-\frac{1}{2}\nabla(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{E})\\&=\nabla\cdot(\boldsymbol{EE})-\frac{1}{2}\nabla\cdot(\boldsymbol{E}^2\boldsymbol{I})\end{aligned}$$

$$(\nabla\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{B}+(\nabla\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{B}=\nabla\cdot(\boldsymbol{BB})-\frac{1}{2}\nabla\cdot(\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{I})$$

方程(7.4.14)变成

$$\boldsymbol{f}=-\nabla\cdot\boldsymbol{T}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}}{\partial t} \tag{7.4.15}$$

其中 $c=1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ 为真空中的光速，$\boldsymbol{I}$ 为单位张量，张量 $\boldsymbol{T}$ 定义为

$$\boldsymbol{T}=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0E^2+\frac{1}{\mu_0}B^2\right)\boldsymbol{I}-\varepsilon_0\boldsymbol{EE}-\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{BB} \tag{7.4.16}$$

利用方程(7.4.15)，方程(7.4.11)化成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}=-\oint\!\!\!\oint_S\boldsymbol{T}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}-\frac{1}{c^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.17}$$

即

$$-\frac{1}{c^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}+\oint\!\!\!\oint_S\boldsymbol{T}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{7.4.18}$$

分析上式：显然左边积分表示体积 V 内电磁场动量的变化率，因此电磁场的**动量密度**定义为

$$\boldsymbol{g}=\frac{1}{c^2}\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}} \tag{7.4.19}$$

而右边第二项表示穿过曲面 S 的动量，因此 $\boldsymbol{T}$ 称为电磁场的**动量流密度张量**. 方

程(7.4.18)表明:体积 V 内电磁场动量的减少率等于带电体机械动量变化率和从曲面上单位时间内流出去的动量之和. 这一结论称为**电磁场的动量守恒定律**.

为了更明确动量流密度张量 $\boldsymbol{T}$ 的物理意义,方程(7.4.18)改写成

$$-\int_V \boldsymbol{f}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} - \oiint_S \boldsymbol{T}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \boldsymbol{g}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.20}$$

上式右边代表体积 V 内电磁场动量的变化率,左边第一项代表带电体对场的作用力,如果认为上式是电磁场的运动方程,那么左边第二项只能是体积 V 外的场对体积 V 内的场的作用力,故又称 $\boldsymbol{T}$ 为 **Maxwell 应力张量**. 因此,由于电磁场的存在,单位面积上的电磁应力为

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}} \tag{7.4.21}$$

当电磁波投射到物体(特别是金属)表面时,物体将受到电磁波的作用力,称为**辐射压力**.

例 7.4.1 带电粒子在外磁场中运动的总动量.

解: 设带电粒子的电量为 q,质量为 m,体积 V 内电磁场的动量为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}_{\mathrm{em}} &= \int_V \boldsymbol{g}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \varepsilon_0\int_V (\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= \varepsilon_0\int_V \boldsymbol{E}\times(\nabla\times\boldsymbol{A})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned} \tag{7.4.22}$$

注意:上式中 $\boldsymbol{E}$ 是带电粒子产生的电场,而 $\boldsymbol{B}$ 是外磁场,带电粒子低速运动时产生的磁场可忽略. 在稳定条件下,$\nabla\times\boldsymbol{E}=0$;$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$,可得到矢量关系

$$\boldsymbol{E}\times(\nabla\times\boldsymbol{A}) = \nabla(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E}) - \nabla\cdot(\boldsymbol{AE}+\boldsymbol{EA}) + \boldsymbol{A}(\nabla\cdot\boldsymbol{E})$$

代入方程(7.4.22)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}_{\mathrm{em}} &= \varepsilon_0\int_V [\nabla(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E}) - \nabla\cdot(\boldsymbol{AE}+\boldsymbol{EA}) + \boldsymbol{A}(\nabla\cdot\boldsymbol{E})]\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= \varepsilon_0\left[\int_V \boldsymbol{A}(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' + \oiint_S (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E})\,\mathrm{d}\boldsymbol{S}' - \oiint_S (\boldsymbol{AE}+\boldsymbol{EA})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}'\right]\end{aligned}$$

当 $S\to\infty$ 时,上式中面积分为零

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}_{\mathrm{em}} &= \varepsilon_0\int_V \boldsymbol{A}(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \varepsilon_0\int_V \boldsymbol{A}(\rho/\varepsilon_0)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= q\int_V \boldsymbol{A}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = q\boldsymbol{A}\end{aligned} \tag{7.4.23}$$

其中把带电粒子的电荷密度表示成 $\rho=q\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$. 由上式,我们得到带电粒子在外磁场中的总动量为

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A} \tag{7.4.24}$$

其中 $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$ 是带电粒子的运动动量,$\boldsymbol{P}$ 称为**正则动量**.

角动量守恒定律:下面导出电磁角动量的表达式及角动量守恒定律. 电磁场对带电体的作用力是

$$\mathrm{d}\boldsymbol{F} = (\rho\boldsymbol{E} + \boldsymbol{j} \times \boldsymbol{B})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.25}$$

对原点的力矩为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{r} \times \mathrm{d}\boldsymbol{F} = \boldsymbol{r} \times (\rho\boldsymbol{E} + \boldsymbol{j} \times \boldsymbol{B})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.26}$$

因此带电体机械角动量的变化率

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}_\mathrm{m}}{\mathrm{d}t} = \int_V \boldsymbol{r} \times (\rho\boldsymbol{E} + \boldsymbol{j} \times \boldsymbol{B})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.27}$$

利用方程(7.4.15)可得到

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}_\mathrm{m}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{g}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} - \int_V \boldsymbol{r} \times (\nabla \cdot \boldsymbol{T})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.28}$$

利用矢量恒等式 $\boldsymbol{r}\times(\nabla\cdot\boldsymbol{T}) = -\nabla\cdot(\boldsymbol{T}\times\boldsymbol{r})$，上式改写成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}_\mathrm{m}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{g}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} - \int_V \nabla \cdot (-\boldsymbol{T} \times \boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.29}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}_\mathrm{m}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{g}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} - \oint\!\!\!\oint_S \nabla \cdot (-\boldsymbol{T} \times \boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{7.4.30}$$

类似于方程(7.4.8)和(7.4.18)的讨论，即可知电磁场的**角动量密度**为

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{g} \tag{7.4.31}$$

角动量流密度张量为

$$\boldsymbol{M} = -\boldsymbol{T} \times \boldsymbol{r} \tag{7.4.32}$$

角动量的存在性可用假想的装置来证明：在静止的塑料圆盘中心线圈上通有直流电 I，产生的磁场 $\boldsymbol{B}$ 与转动轴 z 平行. 圆盘的边缘有一系列带电的金属球. 当电流 I 突然中断，$\boldsymbol{B}$ 突然消失，塑料圆盘将转动. 如果从机械角动量守恒的角度考虑，不存在力矩，塑料圆盘保持不动. 但从另一角度考虑，由于 $\boldsymbol{B}$ 突然消失，在线圈附近会出现环绕转轴的涡旋电场，该电场使圆盘边缘的金属球受力(圆盘边缘切向)，并且产生力矩，使圆盘转动.

对介质中的电磁场能量、动量和角动量可以得到类似的表达式. 但当存在介质时，必须包括极化能量和磁化能量，因此电磁场能量密度公式为

$$w = \frac{1}{2}(\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{D} + \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{H}) \tag{7.4.33}$$

能量密度流矢量和动量密度为

$$\boldsymbol{S}_\mathrm{e} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}, \quad \boldsymbol{g} = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} \tag{7.4.34}$$

而电磁场的动量流密度张量为

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{D} + \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{H})\boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}\boldsymbol{E} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{H} \tag{7.4.35}$$

值得一提的是，由能量流和动量流矢量知道，即使对静电场和静磁场，它们也不为零. 不过由于静磁场线是闭合的，它们以环流的形式存在.

习 题 7

7.1 计算下列各式：

(1) $\nabla \frac{1}{|\boldsymbol{r}|}$； (2) $\nabla \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|}$； (3) $\nabla \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|}$； (4) $\nabla \boldsymbol{r}$； (5) $\nabla^2 \frac{1}{|\boldsymbol{r}|}$；

(6) $\nabla^2 \frac{1}{|\boldsymbol{r}|^2}$； (7) $\nabla \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}$； (8) $\nabla \left(\boldsymbol{a} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right)$($\boldsymbol{a}$ 为常矢量)；

(9) $\nabla \times \left(\boldsymbol{a} \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right)$； (10) $(\boldsymbol{a} \cdot \nabla) \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}$.

答案：

(1) $\nabla \frac{1}{|\boldsymbol{r}|} = -\frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}$； (2) $\nabla \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|} = 0$； (3) $\nabla \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|} = \frac{2}{|\boldsymbol{r}|}$； (4) $\nabla \boldsymbol{r} = \boldsymbol{I}$；

(5) $\nabla^2 \frac{1}{|\boldsymbol{r}|} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r})$； (6) $\nabla^2 \frac{1}{|\boldsymbol{r}|^2} = -\frac{2\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^4}$； (7) $\nabla \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3} = 0$；

(8) $\nabla \left(\boldsymbol{a} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right) = \frac{\boldsymbol{a}}{|\boldsymbol{r}|^3} - \frac{3(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{r})\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^5}$；

(9) $\nabla \times \left(\boldsymbol{a} \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right) = -\nabla \left(\boldsymbol{a} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right) = -\frac{\boldsymbol{a}}{|\boldsymbol{r}|^3} + \frac{3(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{r})\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^5}$；

(10) $(\boldsymbol{a} \cdot \nabla) \times \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3} = \nabla \left(\boldsymbol{a} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^3}\right) = \frac{\boldsymbol{a}}{|\boldsymbol{r}|^3} - \frac{3(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{r})\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|^5}$.

7.2 真空中的势函数为

$$\varphi(r) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

求：(1) 空间电荷分布；(2) 空间总电荷.

答案：

$$\rho(\boldsymbol{r}) = q\left[\delta(\boldsymbol{r}) - \frac{1}{4\pi a^2} \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)\right]; \quad Q = 0.$$

7.3 证明在均匀介质的内部，极化电荷体密度 ρ_{P} 与自由电荷体密度 ρ_{f} 关系

$$\rho_{\mathrm{P}} = -\left(1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}\right)\rho_{\mathrm{f}}$$

(提示：$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{D} - \varepsilon_0 \boldsymbol{E}$， $\rho_{\mathrm{P}} = -\nabla \cdot \boldsymbol{P}$， $\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho_{\mathrm{f}}$)

7.4 半径为 a 的无限长导电圆柱内流有稳定的均匀电流. (1) 计算圆柱表面的能流矢量；(2) 证明进入圆柱体的能量等于产生的 Joule 热. (提示：圆柱体内电场和磁场为 $\boldsymbol{E} = \frac{\boldsymbol{j}}{\sigma} = \frac{j_0}{\sigma}\boldsymbol{e}_z$； $\boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\mu_0 j a \boldsymbol{e}_\varphi$)

答案：$\boldsymbol{S} = j^2 a(-\boldsymbol{e}_r)/(2\sigma)$；$P = S \cdot 2\pi a l$(长为 l 的一段圆柱). 注意：电阻 $R=$

$l/(\pi a^2\sigma)$.

7.5　一点电荷 q 置于均匀外场 $\boldsymbol{E}_0$ 中，求以 q 为圆心的球面所受的应力，并说明意义.（提示：总电场为均匀外场 $\boldsymbol{E}_0$ 与点电荷产生的场之和）

答案：单位面积上的力和合力分别为

$$\boldsymbol{f}=-\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}};\quad \boldsymbol{F}=\iint\boldsymbol{f}\mathrm{d}S=qE_0\boldsymbol{e}_z$$

等于点电荷受到的 Coulomb 力.

7.6　在均匀磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中有一个线电流 I，电流方向与 $\boldsymbol{B}_0$ 垂直. 以线电流为轴线作一圆柱面，计算单位长圆柱面上的作用力（提示：与上题类似，总磁场为均匀外场与线电流产生的场之和. 线电流产生的磁场为

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0 I}{2\pi r^2}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{r}$$

取 $\boldsymbol{B}_0$ 为 x 方向，电流为 z 方向）

答案：作用力 $\boldsymbol{F}=\iint\boldsymbol{f}\mathrm{d}S=IB_0\boldsymbol{e}_y$ 等于线电流受到的 Lorentz 力.

7.7　介电常量为 ε 的均匀无限大介质中有两个相距为 d 的点电荷，电量都为 q. 求在这两个电荷连线的垂直平面上的应力，并且说明意义.（提示：设两电荷位于 $(-d/2,0,0)$ 和 $(d/2,0,0)$，在两个电荷连线的垂直平面上，电场为

$$\boldsymbol{E}=\frac{q\boldsymbol{\rho}}{2\pi\varepsilon(\rho^2+d^2/4)^{3/2}}$$

其中 $\boldsymbol{\rho}$ 为所考虑平面内的位置矢量）

答案：$\boldsymbol{F}=-\dfrac{q^2}{4\pi\varepsilon d^2}\boldsymbol{e}_x$ 等于两个点电荷之间的 Coulomb 作用力.

7.8　将一个位于真空的带电导体球切成两半，设球半径为 R，球上电势为 U_0. 求它们之间的排斥力.（提示：球表面电场为 $\boldsymbol{E}=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{q}{R^2}\boldsymbol{e}_r=\dfrac{U_0}{R}\boldsymbol{e}_r$）

答案：$\boldsymbol{F}=\dfrac{\pi\varepsilon_0}{2}U_0^2\boldsymbol{e}_z$.

7.9　一质量为 m 的不带电球壳浮在介电常量为 ε 的液体上，但有 1/4 的体积浸没在液体中. 如果对它充电并且使它有一半的体积浸没在液体中，求电势.（提示：设电势为 φ，电场为 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{e}_r\varphi/R$，电磁应力为 $\boldsymbol{f}=\boldsymbol{e}_n\varepsilon E^2/2$，球壳受到向下的合电磁力大于零）

答案：向下的合电磁力为

$$F_z=\frac{\pi}{2}(\varepsilon-\varepsilon_0)\varphi^2,\quad \varphi=\sqrt{\frac{2mg}{\pi(\varepsilon-\varepsilon_0)}}.$$

7.10　间距为 d 的平行板电容器垂直浸入不可压缩的液体中，液体的密度为

ρ，介电常量为 ε，电容器两板的电势差为 φ. 求电容器内液体上升的高度.（提示：电容器内电场相同且为 $E=\varphi/d$，但电位移矢量不同，故电磁应力不同，在液面附近应力差为 $F=(\varepsilon-\varepsilon_0)\varphi^2/(2d^2)=\rho gh$）

答案：$h=\dfrac{(\varepsilon-\varepsilon_0)\varphi^2}{2d^2\rho g}$.

7.11 如果点电荷 q 的电场为

$$\boldsymbol{E}=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\boldsymbol{r}}{r^{3+\delta}}$$

其中 $\delta>0$.（1）求 $\nabla\cdot\boldsymbol{E}$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{E}$；（2）$\boldsymbol{E}$ 是保守场吗？（3）Gauss 定理是否还成立？

答案：$\nabla\times\boldsymbol{E}=0$，是保守场，但 Gauss 定理不成立.

7.12 一个半径为 a 的球，表面均匀分布电量 Q 的束缚电荷. 球体被均匀的介电常量为 ε 的流体电介质包围. 流体中的自由电荷密度为 $\rho(\boldsymbol{r})=-kU(\boldsymbol{r})$，其中 k 为常量，$U(\boldsymbol{r})$ 为电势.（1）假定无限远处电势为零，求电势分布；（2）求电介质中压强的分布.（提示：（1）以球心为球坐标原点，电势满足 Poisson 方程

$$\nabla^2U(\boldsymbol{r})=-\frac{\rho(\boldsymbol{r})}{\varepsilon}=k\frac{U(\boldsymbol{r})}{\varepsilon}\quad(r>a)$$

由对称性：$U(\boldsymbol{r})=U(r)$，球内电场为零；（2）球面上 $\iint\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S=Q$；（3）流体静止条件：$p\boldsymbol{n}+\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}=0$，其中 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_r$，$\boldsymbol{T}$ 是电磁张量）

答案：（1）如果 $k>0$

$$U(r)=\frac{A}{r}\exp\left[-\frac{1}{r}\sqrt{\frac{k}{\varepsilon}}\right]$$

A 由球面电荷守恒条件决定；如果 $k<0$

$$U(r)=\frac{A}{r}\cos\left[\frac{1}{r}\sqrt{-\frac{k}{\varepsilon}}\right];\quad(2)\ p=-\frac{\varepsilon}{2}(\nabla U)^2$$

第 8 章　静电场和静磁场

静电场或静磁场(简称为静场)是电磁场分布的特殊情况,即电场或磁场不随时间变化.由 Maxwell 方程组知道,在静场问题中电场和磁场是相互独立的.在一个体系中如果不仅包含电荷、电流分布,而且在电荷、电流周围还存在导体、电介质或磁介质,这些介质上诱导的电荷或电流又影响原来电荷、电流激发的场.为了使这复杂的问题简单化,一般把电荷、电流激发的场用微分方程描述,而把周围的导体或介质作为边界条件来处理.

8.1　静电场的唯一性和相互作用能

由 Maxwell 方程组,对静场问题

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho; \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = 0 \tag{8.1.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} \tag{8.1.2}$$

其中 $\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H}$,故静电场和静磁场可以分开讨论,本节讨论静电场.由式(8.1.1)中第二个方程 $\nabla\times\boldsymbol{E}=0$,可以引进标量势函数 $\varphi(\boldsymbol{r})$,$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=-\nabla\varphi(\boldsymbol{r})$,代入式(8.1.1)中第一个方程得到

$$\nabla \cdot (\varepsilon\nabla\varphi) = -\rho \tag{8.1.3}$$

对均匀的介质,上式简化为

$$\nabla^2\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \tag{8.1.4}$$

称为 **Poisson 方程**,当 $\rho=0$ 时,称为 **Laplace 方程**.结合相应的边界条件,静电问题就是解 Poisson 方程(或 Laplace 方程)的边值问题.下面分几种情况讨论边界条件.

1. 分界面两侧是不同的电介质:由 7.3 节讨论,边界条件为

$$(\boldsymbol{D}_2 - \boldsymbol{D}_1) \cdot \boldsymbol{n} = \sigma_f; \quad (\boldsymbol{E}_2 - \boldsymbol{E}_1) \cdot \boldsymbol{t} = 0 \tag{8.1.5}$$

因此电场矢量的切向分量连续,而电位移矢量的法向存在突变.如果电介质表面不存在自由电荷,电位移矢量的法向也连续;

2. 分界面的一侧是电介质(用 2 表示)(或者空气,或者真空),而另一侧是导体(用 1 表示):如果在导体内存在电场 $\boldsymbol{E}$,必产生传导电流 $\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}$,而传导电流(运动的电荷)又要产生磁场,电磁场方程必将耦合,而这与 Maxwell 方程矛盾!故导体内的电场为零.由于电场的切向分量连续,因此电场垂直于导体表面.又 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=$

$-\nabla\varphi(\boldsymbol{r})$，电场 $\boldsymbol{E}$ 的切向导数为零，意味着导体表面的电势相等，导体表面是等势面. 边界条件为

$$\boldsymbol{D}_2 \cdot \boldsymbol{n} = \sigma_f; \quad \boldsymbol{E}_2 \cdot \boldsymbol{t} = 0 \tag{8.1.6}$$

唯一性定理：如果静电体系内存在电荷分布和电介质分布，并且关系式 $\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$（注意：$\varepsilon$ 可以与空间有关，即不均匀电介质）成立，则体系的电场由电荷分布、电介质分布以及边界上的 φ 或者 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D}$ 唯一确定.

证明：设体系存在两个不同的解：$(\varphi',\boldsymbol{E}',\boldsymbol{D}')$ 和 $(\varphi'',\boldsymbol{E}'',\boldsymbol{D}'')$，引进辅助函数 $\boldsymbol{Z}(\boldsymbol{r})=(\varphi'-\varphi'')(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')$，作体积分

$$\begin{aligned}\int_V \nabla\cdot\boldsymbol{Z}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} &= \int_V \nabla\cdot[(\varphi'-\varphi'')(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \iint_S (\varphi'-\varphi'')(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S\end{aligned} \tag{8.1.7}$$

而

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{Z}(\boldsymbol{r}) &= \nabla\cdot[(\varphi'-\varphi'')(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')] \\ &= (\nabla\varphi'-\nabla\varphi'')\cdot(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')+(\varphi'-\varphi'')(\nabla\cdot\boldsymbol{D}'-\nabla\cdot\boldsymbol{D}'')\end{aligned}$$

因讨论的是同一个体系，故 $\nabla\cdot\boldsymbol{D}'=\rho$，$\nabla\cdot\boldsymbol{D}''=\rho$，代入上式得到

$$\nabla\cdot\boldsymbol{Z}(\boldsymbol{r}) = -(\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{E}'')\cdot(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'') \tag{8.1.8}$$

代入方程(8.1.7)的左边得到

$$\int_V (\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{E}'')\cdot(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = -\iint_S (\varphi'-\varphi'')(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S \tag{8.1.9}$$

在边界上：$\varphi'|_S=\varphi''|_S$；$\boldsymbol{D}'\cdot\boldsymbol{n}|_S=\boldsymbol{D}''\cdot\boldsymbol{n}|_S$，故上式简化为

$$\int_V (\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{E}'')\cdot(\boldsymbol{D}'-\boldsymbol{D}'')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0 \tag{8.1.10}$$

如果 $\boldsymbol{E}'=\varepsilon\boldsymbol{D}'$ 和 $\boldsymbol{E}''=\varepsilon\boldsymbol{D}''$，则

$$\int_V \varepsilon(\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{E}'')\cdot(\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{E}'')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0 \tag{8.1.11}$$

而 $\varepsilon\geqslant 1$，只有 $\boldsymbol{E}'=\boldsymbol{E}''$，唯一性得证.

必须指出，在介质的静电学中 $\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 不一定是线性关系，一般 $\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 有一个函数关系，如果这个函数是单值、单调且递增的，由式(8.1.10)，唯一性仍然成立. 但对铁电介质，唯一性定理不成立，因存在电滞回线，$\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 不再是单值的函数关系. 另外，如果体系存在导体，则可以把导体表面作为边界面处理，在导体表面：$\boldsymbol{D}'\cdot\boldsymbol{n}|_S=\boldsymbol{D}''\cdot\boldsymbol{n}|_S=\sigma_f$，结论仍然成立.

具体解静电问题（即解 Poisson 方程或者 Laplace 方程的边值问题）有多种解析方法，包括镜像法、分离变量法、Green 函数法和多极矩展开法等. 除多极矩展开法将在第 8.3 节介绍外，本书不系统介绍其他方法，仅举一个例子.

例 8.1.1 半径为 a、具有介电常量 ε_1 的介质球，放在均匀电场 $\boldsymbol{E}_0$ 中，球外的

介电常量为 ε. 求球内外电场的分布.

解：在均匀电场 $\boldsymbol{E}_0$ 的作用下，介质球表面产生极化电荷，总的电场应该是均匀电场 $\boldsymbol{E}_0$ 与极化电荷产生的场的叠加. 在球坐标中，Laplace 方程为

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Phi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial\Phi}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = 0 \tag{8.1.12}$$

分离变量解为

$$\Phi(r,\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{|m|<l}[A_{lm}r^l + B_{lm}r^{-(l+1)}]Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{8.1.13}$$

其中 $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ 为球谐函数. 取球心为原点，z 轴方向（即球坐标的极轴方向）为均匀电场 $\boldsymbol{E}_0$ 的方向，垂直于 $\boldsymbol{E}_0$ 且通过球心的平面为 xOy 平面，则问题关于 φ 对称. 设球内、外电势分别为 Φ_1 和 Φ_2，边界条件为

$$\begin{gathered}\Phi_1\big|_{r=0} < \infty;\quad \Phi_2\big|_{r\to\infty} = -E_0 r\cos\vartheta \\ \Phi_1\big|_{r=a} = \Phi_2\big|_{r=a};\quad \varepsilon_1\left(\frac{\partial\Phi_1}{\partial n}\right)\bigg|_{r=a} = \varepsilon\left(\frac{\partial\Phi_2}{\partial n}\right)\bigg|_{r=a}\end{gathered} \tag{8.1.14}$$

因为：(1)对称性，$m=0$；(2)无限远处只是 $\cos\vartheta$ 的一次. 所以在球外，一般解式(8.1.13)中取两项，即 $l=0$ 和 1

$$\Phi_2(r,\vartheta) = \frac{B_{00}}{r} + A_{10}r\cos\vartheta + \frac{B_{10}}{r^2}\cos\vartheta \tag{8.1.15}$$

而在球内要求原点处有限，故一般解式(8.1.13)只取一项

$$\Phi_1(r,\vartheta) = A'_{10}r\cos\vartheta \tag{8.1.16}$$

式(8.1.15)的第一项表示位于原点的点电荷产生的场，而假定原点不存在点电荷，故取 $B_{00}=0$；由 $\Phi_2\big|_{r\to\infty} = -E_0 r\cos\vartheta$ 得到 $A_{10}=-E_0$. 另外两个系数 B_{10} 和 A'_{10} 由球面上的边界条件决定

$$B_{10} = \frac{\varepsilon_1-\varepsilon}{\varepsilon_1+2\varepsilon}E_0a^3;\quad A'_{10} = -\frac{3\varepsilon}{\varepsilon_1+2\varepsilon}E_0 \tag{8.1.17}$$

因此球内、外电势分布分别为

$$\begin{aligned}\Phi_1(r,\vartheta) &= -\frac{3\varepsilon}{\varepsilon_1+2\varepsilon}E_0 r\cos\vartheta \\ \Phi_2(r,\vartheta) &= -E_0 r\cos\vartheta + \frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{r^3}\end{aligned} \tag{8.1.18}$$

其中

$$\boldsymbol{p} = 4\pi\varepsilon a^3\frac{\varepsilon_1-\varepsilon}{\varepsilon_1+2\varepsilon}\boldsymbol{E}_0 \tag{8.1.19}$$

上式表明极化面电荷相当于在球心的电偶极矩. 球内、外的电场矢量分别为

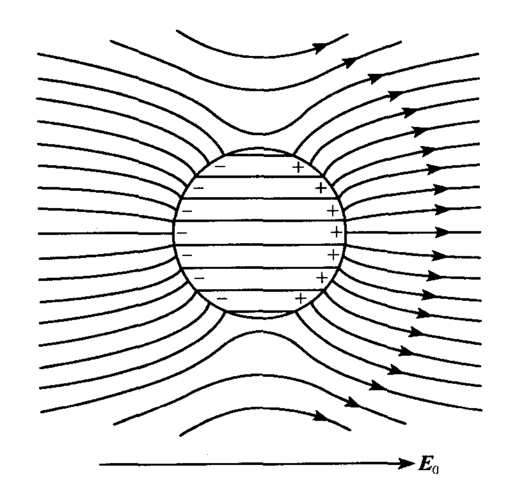


图 8.1.1 均匀电场 E_0 中的介质球

$$\boldsymbol{E}_1 = \frac{3\varepsilon}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon}\boldsymbol{E}_0$$

$$\boldsymbol{E}_2 = \boldsymbol{E}_0 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon}a^3 E_0\left(\frac{2\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r + \sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta}{r^3}\right) \tag{8.1.20}$$

可见球内仍然是均匀场，极化电荷产生的场为

$$\boldsymbol{E}_p \equiv \boldsymbol{E}_1 - \boldsymbol{E}_0 = -\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon}\boldsymbol{E}_0 \tag{8.1.21}$$

一般 $\varepsilon_1 > \varepsilon$，故在 $\vartheta = 0$ 面，极化电荷为正，而在 $\vartheta = \pi$ 面，极化电荷为负，如图 8.1.1，图中画出了球内外的电场线.

静电场的能量：电磁场的能量密度由式(7.4.9)给出，对静电场，可假定磁场为零，于是总的静电场能量为

$$U_e = \frac{1}{2}\int \varepsilon_0 \boldsymbol{E}^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.1.22}$$

假定电场由两部分组成：电荷密度分布 $\rho_1(\boldsymbol{r})$ 和 $\rho_2(\boldsymbol{r})$ 分别产生电场 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$. 由叠加原理，$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2$，代入上式得到

$$U_e = \frac{1}{2}\varepsilon_0\int \boldsymbol{E}_1^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\varepsilon_0\int \boldsymbol{E}_2^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \varepsilon_0\int \boldsymbol{E}_1 \cdot \boldsymbol{E}_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.1.23}$$

显然，上式第一、二项分别表示电场 $\boldsymbol{E}_1$ 或 $\boldsymbol{E}_2$ 本身的能量，称为**自能**；而最后一项可看作电荷密度分布 $\rho_1(\boldsymbol{r})$ 和 $\rho_2(\boldsymbol{r})$ 的**相互作用能**. 由电场与电势的关系 $\boldsymbol{E} = -\boldsymbol{\nabla}\varphi$，上式可写成

$$U_e = \frac{1}{2}\varepsilon_0\int (\boldsymbol{\nabla}\varphi_1)^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\varepsilon_0\int (\boldsymbol{\nabla}\varphi_2)^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \varepsilon_0\int (\boldsymbol{\nabla}\varphi_1)\cdot(\boldsymbol{\nabla}\varphi_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.1.24}$$

利用 Green 公式，可写成

$$\begin{aligned} U_e = &\frac{1}{2}\varepsilon_0\left(\iint_S \varphi_1 \frac{\partial\varphi_1}{\partial n}\mathrm{d}S - \int \varphi_1 \boldsymbol{\nabla}^2\varphi_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right) \\ &+ \frac{1}{2}\varepsilon_0\left(\iint_S \varphi_2 \frac{\partial\varphi_2}{\partial n}\mathrm{d}S - \int \varphi_2 \boldsymbol{\nabla}^2\varphi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right) \\ &+ \varepsilon_0\left(\iint_S \varphi_1 \frac{\partial\varphi_2}{\partial n}\mathrm{d}S - \int \varphi_1 \boldsymbol{\nabla}^2\varphi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right) \end{aligned} \tag{8.1.25}$$

当积分面趋向无限，面积分项为零，又注意关系 $\varepsilon_0 \boldsymbol{\nabla}^2\varphi = -\rho$，故

$$U_e = \frac{1}{2}\int \rho_1\varphi_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\int \rho_2\varphi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \int \rho_2\varphi_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.1.26}$$

方程(8.1.25)最后一项中 $\varphi_1 \leftrightarrow \varphi_2$ 也成立，故相互作用能可写作

$$\begin{aligned} U_{12} = U_{21} &= \int \rho_2\varphi_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int \rho_1\varphi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \frac{1}{2}\left[\int \rho_2\varphi_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \int \rho_1\varphi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right] \end{aligned} \tag{8.1.27}$$

例 8.1.2　电介质系统中电位移矢量从 $\boldsymbol{D}$ 增加到 $\boldsymbol{D}+\mathrm{d}\boldsymbol{D}$，求外界做的功.

解：　假定空间的电荷密度变化引起静电场能量的变化为 δU，外界做的功 δW_e 包括两部分：移动电荷做的功；电介质极化做的功. 表达式为

$$\delta W_e = \delta U = \int \varphi\delta\rho \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.1.28a}$$

利用 $\rho = \nabla\cdot\boldsymbol{D}$ 和 $\delta\rho = \nabla\cdot\delta\boldsymbol{D}$，上式可表示为

$$\begin{aligned} \delta W_e &= \int \varphi\nabla\cdot(\delta\boldsymbol{D})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int \nabla\cdot(\varphi\delta\boldsymbol{D})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} - \int \delta\boldsymbol{D}\cdot\nabla\varphi \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \oint_S \varphi\delta\boldsymbol{D}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \int \boldsymbol{E}\cdot\delta\boldsymbol{D}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int \boldsymbol{E}\cdot\delta\boldsymbol{D}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \end{aligned} \tag{8.1.28b}$$

得到最后一个等式，已假定电介质局限在有限区域内，只要 S 足够大，在 S 面上 $\delta\boldsymbol{D}=0$. 因此，电介质中电位移矢量变化 $\mathrm{d}\boldsymbol{D}$ 时，外界对单位体积电介质做功为

$$\mathrm{d}w_e = \boldsymbol{E}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{D} \tag{8.1.28c}$$

稳恒电流产生的电场：在导电介质中存在稳恒电流情况，尽管电荷在移动而形成电流，但空间各点的电荷密度不随时间变化，产生的电场仍然是静电场. 在导体中，由于 Joule 热而电能不断地转化为热能，因此存在稳恒电流的基本条件是外界必须不断提供能量. 由于空间电荷密度不随时间变化，由 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}+\partial\rho/\partial t=0$ 得到稳恒电流的方程：$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$. 因此，电场满足 Maxwell 方程组、稳恒电流方程和导电介质的本构方程

$$\begin{aligned} &\nabla\cdot\boldsymbol{D} = \rho; \quad \nabla\times\boldsymbol{E} = 0 \\ &\nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0; \quad \boldsymbol{j} = \sigma\boldsymbol{E} \end{aligned} \tag{8.1.29}$$

注意：现在 ρ 未知，不能用方程(8.1.29)中第一式求 $\boldsymbol{D}$. 由方程(8.1.29)中第二式，仍然可以定义势函数：$\boldsymbol{E}=-\nabla\psi(\boldsymbol{r})$，代入方程(8.1.29)中第三、四式得到

$$\nabla^2\psi = 0 \tag{8.1.30}$$

方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$ 的积分形式为

$$\iint_S \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S = 0 \tag{8.1.31}$$

由电场的切向边界条件 $(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)\cdot\boldsymbol{t}=0$ 和上式可以得到电流密度满足的边界条件

$$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{j}_1-\boldsymbol{j}_2) = 0; \quad \left(\frac{\boldsymbol{j}_1}{\sigma_1}-\frac{\boldsymbol{j}_2}{\sigma_2}\right)\cdot\boldsymbol{t} = 0 \tag{8.1.32}$$

或者用势函数表示

$$\sigma_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial n} = \sigma_2 \frac{\partial \psi_2}{\partial n}; \quad \psi_1 = \psi_2 \tag{8.1.33}$$

而电介质中的电荷密度为

$$\rho = -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \psi) = \nabla \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\sigma} \boldsymbol{j}\right) = \boldsymbol{j} \cdot \nabla \frac{\varepsilon}{\sigma} \tag{8.1.34}$$

其中利用了$\nabla \cdot \boldsymbol{j}=0$. 可见只有空间不均匀的电介质,才可能有电荷存在. 对分块均匀的电介质,电荷只能出现在边界面上,电荷面密度为

$$\sigma_f = (\boldsymbol{D}_2 - \boldsymbol{D}_1) \cdot \boldsymbol{n} = \left(\frac{\varepsilon_2}{\sigma_2} \boldsymbol{j}_2 - \frac{\varepsilon_1}{\sigma_1} \boldsymbol{j}_1\right) \cdot \boldsymbol{n} = \left(\frac{\varepsilon_2}{\sigma_2} - \frac{\varepsilon_1}{\sigma_1}\right) \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{n} \tag{8.1.35}$$

其中已利用了 $\boldsymbol{n} \cdot (\boldsymbol{j}_1 - \boldsymbol{j}_2) = 0$.

例 8.1.3 半径为 a 的小球(电导率为 σ_1,介电常量为 ε_1)放在均匀的液体中(电导率为 σ,介电常量为 ε),液体中通有恒定电流 $\boldsymbol{j}$,求小球内外电势、电场和电流密度.

解: 设恒定电流 $\boldsymbol{j}$ 方向为 z 方向,球内、外电势分别为 ψ_1 和 ψ_2,并满足 Laplace 方程. 边界条件为

$$\psi_1 \big|_{r=0} < \infty; \quad \psi_2 \big|_{r\to\infty} = -E_2 r\cos\vartheta = -\frac{j}{\sigma} r\cos\vartheta \tag{8.1.36}$$

$$\psi_1 \big|_{r=a} = \psi_2 \big|_{r=a}; \quad \sigma_1 \frac{\partial \psi_1}{\partial r}\bigg|_{r=a} = \sigma \frac{\partial \psi_2}{\partial r}\bigg|_{r=a} \tag{8.1.37}$$

因此本例与例 8.1.1 相似,不难得到结果为

$$\psi_1 = -\frac{3j}{\sigma_1 + 2\sigma} r\cos\vartheta \tag{8.1.38}$$

$$\psi_2 = -\frac{(\sigma_1 - \sigma) a^3 j}{\sigma(\sigma_1 + 2\sigma)} \frac{\cos\vartheta}{r^2} - \frac{j}{\sigma} r\cos\vartheta \tag{8.1.39}$$

电场强度为

$$\boldsymbol{E}_1 = -\nabla \psi_1 = -\frac{3}{\sigma_1 + 2\sigma} \boldsymbol{j} \tag{8.1.40}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}_2 = -\nabla \psi_2 &= \frac{(\sigma_1 - \sigma) a^3}{\sigma(\sigma_1 + 2\sigma)} \left[\frac{3(\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{r})\boldsymbol{r}}{r^5} - \frac{\boldsymbol{j}}{r^3}\right] + \frac{\boldsymbol{j}}{\sigma} \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon} \frac{3(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r})\boldsymbol{r} - r^2 \boldsymbol{p}}{r^5} + \frac{\boldsymbol{j}}{\sigma} \end{aligned} \tag{8.1.41}$$

其中

$$\boldsymbol{p} = 4\pi\varepsilon \frac{(\sigma_1 - \sigma) a^3}{\sigma(\sigma_1 + 2\sigma)} \boldsymbol{j} \tag{8.1.42}$$

可见导电小球也相当于一个电偶极子. 小球表面电荷密度为

$$\sigma_f = (\boldsymbol{D}_2 - \boldsymbol{D}_1)\big|_{r=a} \cdot \boldsymbol{n} = \frac{3(\varepsilon\sigma_1 - \varepsilon_1\sigma)a^3}{\sigma(\sigma_1 + 2\sigma)} j\cos\vartheta \tag{8.1.43}$$

8.2 静磁场的唯一性和磁标量势

稳定电流密度分布 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$产生的磁场满足 Maxwell 方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} \tag{8.2.1}$$

对一般的磁介质(见下面讨论)本构关系为 $\boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H}$. 由上式第一式,可以定义矢量势 $\boldsymbol{A}$,使 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$,代入第二式且利用本构关系得到

$$\nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{A}) - \nabla^2\boldsymbol{A} = \mu\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{8.2.2}$$

由于通过求 $\boldsymbol{A}$ 的旋度而得到磁场 $\boldsymbol{B}$,故 $\boldsymbol{A}$ 可以加上一个任意函数的梯度而磁场 $\boldsymbol{B}$ 不变,即

$$\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A} = \nabla\times(\boldsymbol{A}+\nabla\chi) = \nabla\times\boldsymbol{A} + \nabla\times(\nabla\chi) \tag{8.2.3}$$

上式说明 $\boldsymbol{A}$ 具有一定的任意性,结合方程(8.2.2),选择 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 比较方便. 注意:在 7.1 节中 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 是由稳恒电流条件 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=0$ 给出的. 另一方面,从矢量场的角度来看,方程 $\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$ 仅仅给出了 $\boldsymbol{A}$ 的旋度,为了完全确定矢量 $\boldsymbol{A}$,还必须给出它的散度 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}$. 选择 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 称为 Coulomb 规范(在第 10 章介绍). 因此矢量势 $\boldsymbol{A}$ 满足的方程为

$$\nabla^2\boldsymbol{A} = -\mu\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) \tag{8.2.4}$$

上式满足的边界条件由方程(7.3.24)和(7.3.29)给出

$$(\boldsymbol{B}_2 - \boldsymbol{B}_1)\cdot\boldsymbol{n} = 0, \quad (\boldsymbol{H}_2 - \boldsymbol{H}_1)\times\boldsymbol{n} = \boldsymbol{k}_f \tag{8.2.5}$$

利用积分关系

$$\iint_S \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S = \iint_S (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S = \oint_L \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = 0 \tag{8.2.6}$$

取图 7.3.2 的回路,边界条件 $(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)\cdot\boldsymbol{n}=0$ 也可写成

$$(\boldsymbol{A}_2 - \boldsymbol{A}_1)\times\boldsymbol{n} = 0 \tag{8.2.7}$$

即矢量势 $\boldsymbol{A}$ 的切向分量连续.

唯一性定理:如果静磁体系内存在电流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$和满足本构关系的磁介质 $\boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H}$(注意:$\mu$ 可以与空间有关,即不均匀磁介质),则体系内的静磁场 $\boldsymbol{B}$ 由 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ 以及边界上矢量势 $\boldsymbol{A}$ 或者磁场 $\boldsymbol{H}$ 的切向分量唯一决定.

证明:设对同一个体系存在两组不同的解 $\boldsymbol{B}'$ 和 $\boldsymbol{B}''$,使下列诸式成立

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{B}' = \nabla\times\boldsymbol{A}'; \quad \boldsymbol{B}'' = \nabla\times\boldsymbol{A}''; \quad \boldsymbol{B}' = \mu\boldsymbol{H}' \\ &\boldsymbol{B}'' = \mu\boldsymbol{H}''; \quad \nabla\times\boldsymbol{H}' = \boldsymbol{j}; \quad \nabla\times\boldsymbol{H}'' = \boldsymbol{j} \end{aligned} \tag{8.2.8}$$

令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}'-\boldsymbol{B}''$, $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}'-\boldsymbol{H}''$,对应的矢量势为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}'-\boldsymbol{A}''$. 显然,$\nabla\times\boldsymbol{H}=0$. 这个场的能量为

$$U_m = \frac{1}{2}\int \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{H}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{2}\int (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{H}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$= \frac{1}{2}\int [\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{H}) + \boldsymbol{A}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{H})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.9}$$

把$\nabla\times\boldsymbol{H}=0$代入上式且把体积分化成面积分得到

$$U_m = \frac{1}{2}\iint_S (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S = \frac{1}{2}\iint_S [\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{A}'-\boldsymbol{A}'')]\cdot\boldsymbol{H}\mathrm{d}S \tag{8.2.10}$$

如果在边界上$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A}''$,那么上式右边为零

$$U_m = \frac{1}{2}\int (\boldsymbol{B}'-\boldsymbol{B}'')\cdot(\boldsymbol{H}'-\boldsymbol{H}'')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$= \frac{1}{2}\int \frac{1}{\mu}(\boldsymbol{B}'-\boldsymbol{B}'')\cdot(\boldsymbol{B}'-\boldsymbol{B}'')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0 \tag{8.2.11}$$

于是得到:$\boldsymbol{B}'=\boldsymbol{B}''$,即唯一性得证;如果在边界上$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{H}'=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{H}''$,方程(8.2.10)写成

$$U_m = \frac{1}{2}\iint_S (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S = \frac{1}{2}\iint_S [(\boldsymbol{H}'-\boldsymbol{H}'')\times\boldsymbol{n}]\cdot\boldsymbol{A}\mathrm{d}S \tag{8.2.12}$$

上式右边同样为零.

静磁场的能量:由式(8.2.9)

$$U_m = \frac{1}{2}\int \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{H}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{2}\int (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{H}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$= \frac{1}{2}\int [\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{H}) + \boldsymbol{A}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{H})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.13a}$$

把$\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{j}$代入上式且把体积分化成面积分得到

$$U_m = \frac{1}{2}\iint_S (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}_1S + \frac{1}{2}\int \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$= \frac{1}{2}\int \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.13b}$$

得到上式,已取积分面趋向无限,面积分项为零.与静电场类似,设$(\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2)$分布由电流密度$(\boldsymbol{j}_1,\boldsymbol{j}_2)$产生,则

$$U_m = \frac{1}{2}\int \boldsymbol{A}_1\cdot\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\int \boldsymbol{A}_2\cdot\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\int (\boldsymbol{A}_2\cdot\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{A}_1\cdot\boldsymbol{j}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.13c}$$

故相互作用能为

$$U_{12} = U_{21} = \frac{1}{2}\int (\boldsymbol{A}_2\cdot\boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{A}_1\cdot\boldsymbol{j}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$= \int \boldsymbol{A}_2\cdot\boldsymbol{j}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int \boldsymbol{A}_1\cdot\boldsymbol{j}_2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.13d}$$

比较上式与(8.1.26)和(8.1.27),可见$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{j})$与$(\varphi,\rho)$起类似的作用.

例 8.2.1　磁介质系统中磁感应强度矢量从 $\boldsymbol{B}$ 增加到 $\boldsymbol{B}+\mathrm{d}\boldsymbol{B}$,求外界做的功.

解:　假定建立磁场过程中,面积为 $\mathrm{d}S$ 的某个回路中电流为 I,则 $\mathrm{d}t$ 时间内电源做的功为

$$\mathrm{d}W_{\mathrm{m}} = \varepsilon_{\mathrm{e}} I\mathrm{d}t = -\varepsilon I\mathrm{d}t = \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} I\mathrm{d}t = I\mathrm{d}\Psi = I\delta\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

其中 ε_{e} 是电源电动势,ε 是感应电动势,$\delta\boldsymbol{B}$ 为磁场的变化. 考虑某区域中电流密度为 $\boldsymbol{j}$,建立电流和磁场的过程无限缓慢,始终保持满足稳恒电流条件 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$. 电源克服感应电动势而对整个磁介质系统做功为

$$\begin{aligned}\Delta W_{\mathrm{m}} &= \int_S I\delta\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_S I(\nabla\times\delta\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} \\ &= \oint_C I\delta\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l} = \int_V \delta\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{8.2.14a}$$

注意:电流 I 和电流密度 $\boldsymbol{j}$ 的关系

$$\oint_C I\mathrm{d}\boldsymbol{l} = \int_V \boldsymbol{j}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.14b}$$

利用 $\boldsymbol{j}=\nabla\times\boldsymbol{H}$ 代入上式

$$\begin{aligned}\Delta W_{\mathrm{m}} &= \int_V \delta\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{H})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_V [\boldsymbol{H}\cdot(\nabla\times\delta\boldsymbol{A}) + \nabla\cdot(\boldsymbol{H}\times\delta\boldsymbol{A})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \int_V \boldsymbol{H}\cdot(\nabla\times\delta\boldsymbol{A})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + \oint_S (\boldsymbol{H}\times\delta\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}\end{aligned} \tag{8.2.14c}$$

由于电流分布在有限区域内,取 S 足够大,上式面积分为零. 于是

$$\Delta W_{\mathrm{m}} = \int_V \boldsymbol{H}\cdot(\nabla\times\delta\boldsymbol{A})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_V \boldsymbol{H}\cdot\delta(\nabla\times\boldsymbol{A})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_V \boldsymbol{H}\cdot\delta\boldsymbol{B}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.2.14d}$$

因此,磁介质中磁感应强度矢量变化 $\mathrm{d}\boldsymbol{B}$ 时,外界对单位体积磁介质做的功为

$$\mathrm{d}w_{\mathrm{m}} = \boldsymbol{H}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{B} \tag{8.2.14e}$$

注意:式(8.1.28c)和式(8.2.14e)在讨论电介质和磁介质的热力学性质时有重要的应用(见第 19 章).

二维问题: 电流密度矢量只有 z 方向的分量

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}_z j(x,y) \tag{8.2.15a}$$

而且体系的边界面也是二维的. 由方程(8.2.4),矢量势 $\boldsymbol{A}$ 也只有 $\boldsymbol{e}_z$ 方向的分量

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}_z A(x,y) \tag{8.2.15b}$$

以上两式代入方程(8.2.4)得到

$$\nabla^2 A = -\mu j \tag{8.2.15c}$$

边界条件式(8.2.7)化为$(A_2-A_1)=0$. 在柱坐标(r,φ,z)下

$$(\nabla\times\boldsymbol{A})_\varphi = \left(\frac{\partial A_\rho}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial r}\right)\boldsymbol{e}_z = -\frac{\partial A_z}{\partial r}\boldsymbol{e}_z \tag{8.2.16}$$

故边界条件$(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}_f$化为

$$\frac{1}{\mu_1}\frac{\partial A_1}{\partial r}-\frac{1}{\mu_2}\frac{\partial A_2}{\partial r}=-k_f \tag{8.2.17}$$

可见求二维静磁问题的矢量势与静电势的求解是完全一样的.

例 8.2.2 磁导率为μ、半径为R的圆柱形导电磁介质通有电流I,并且置于均匀磁场$\boldsymbol{B}_0$中,磁场方向与圆柱轴垂直,即$\boldsymbol{B}_0$沿x方向.求空间的磁场分布.

解: 当$r>R$时,空间磁场由三部分组成:均匀磁场$\boldsymbol{B}_0$、电流I产生的磁场以及导电磁介质表面的极化电流产生的场;当$r<R$时,空间磁场由两部分组成:电流密度j产生的磁场和极化电流产生的场.圆柱内、外势满足的基本方程为

$$\nabla^2 A_1=-\mu j\quad (r<R);\quad \nabla^2 A_2=0\quad (r>R) \tag{8.2.18}$$

其中$j=I/(\pi R^2)$.在$r=R$处边界条件为

$$A_1|_{r=R}=A_2|_{r=R};\quad \left(\frac{1}{\mu}\frac{\partial A_1}{\partial r}\right)\Bigg|_{r=R}=\left(\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial A_2}{\partial r}\right)\Bigg|_{r=R} \tag{8.2.19}$$

上式中假定面电流密度为零.在无限远处和原点的边界条件为(见习题 8.9)

$$A_1|_{r=0}<\infty;\quad A_2|_{r\to\infty}\to -B_0 y=-B_0 r\sin\varphi \tag{8.2.20}$$

在二维极坐标下 Laplace 算子为

$$\nabla^2=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{8.2.21}$$

Laplace 方程的通解为

$$\begin{aligned}A(r,\varphi)=&e_0\ln r+\sum_{n=0}^{\infty}(c_n\cos n\varphi+d_n\sin n\varphi)r^{-n}\\&+\sum_{n=0}^{\infty}(a_n\cos n\varphi+b_n\sin n\varphi)r^n\end{aligned} \tag{8.2.22}$$

但方程(8.2.18)中第一式是 Poisson 方程,必须找出一个特解(即电流密度j产生的磁场)把非齐次项消去,这个特解为$A_0=-\mu r^2 j/4$.又由无限远边界条件,矢量势只与$\sin\varphi$的一次方有关,故矢量势可写成

$$A_1(r,\varphi)=-\frac{1}{4}\mu r^2 j+b_1 r\sin\varphi \tag{8.2.23}$$

$$A_2(r,\varphi)=c_0+e_0\ln r+B_0 r\sin\varphi+\frac{c_1}{r}\sin\varphi \tag{8.2.24}$$

由方程(8.2.19)

$$\begin{aligned}&c_0+e_0\ln R+\left(B_0 R+\frac{c_1}{R}\right)\sin\varphi=-\frac{1}{4}\mu R^2 j+b_1 R\sin\varphi\\&\frac{1}{\mu_0}\left[\frac{e_0}{R}+\left(B_0-\frac{c_1}{R^2}\right)\sin\varphi\right]=\frac{1}{\mu}\left[-\frac{1}{2}\mu R j+b_1\sin\varphi\right]\end{aligned} \tag{8.2.25}$$

上式恒成立的条件是

$$c_0+e_0\ln R=-\frac{1}{4}\mu R^2 j;\quad \left(B_0 R+\frac{c_1}{R}\right)=b_1 R$$
$$\frac{1}{\mu_0}\frac{e_0}{R}=-\frac{1}{2}Rj;\quad \frac{1}{\mu_0}\left(B_0-\frac{c_1}{R^2}\right)=\frac{b_1}{\mu} \tag{8.2.26}$$

由上式求得

$$e_0=-\frac{1}{2}R^2\mu_0 j=-\frac{I}{2\pi}\mu_0;\quad c_0=\frac{I}{2\pi}\left(\mu_0\ln R-\frac{1}{2}\mu\right)$$
$$c_1=B_0R^2\frac{\mu-\mu_0}{\mu+\mu_0};\quad b_1=B_0\frac{2\mu}{\mu+\mu_0} \tag{8.2.27}$$

代入方程(8.2.23)和(8.2.24)得到

$$A_1(r,\varphi)=-\frac{1}{4}\mu r^2 j+\frac{2\mu}{\mu+\mu_0}B_0 r\sin\varphi$$
$$A_2(r,\varphi)=\frac{\mu_0 I}{2\pi}\ln\frac{R}{r}-\frac{\mu I}{4\pi}+B_0 r\left(1+\frac{\mu-\mu_0}{\mu+\mu_0}\frac{R^2}{r^2}\right)\sin\varphi \tag{8.2.28}$$

磁感应强度为

$$\boldsymbol{B}_1(r,\vartheta)=\frac{1}{r}\frac{\partial A_1}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_r-\frac{\partial A_1}{\partial r}\boldsymbol{e}_\varphi=B_0\frac{2\mu}{\mu+\mu_0}\cos\varphi\boldsymbol{e}_r$$
$$+\left(\frac{1}{2}\mu jr-B_0\frac{2\mu}{\mu+\mu_0}\sin\varphi\right)\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.29}$$

$$\boldsymbol{B}_2(r,\vartheta)=\frac{1}{r}\frac{\partial A_2}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_r-\frac{\partial A_2}{\partial r}\boldsymbol{e}_\varphi=B_0\cos\varphi\left(1+\frac{R^2}{r^2}\frac{\mu-\mu_0}{\mu+\mu_0}\right)\boldsymbol{e}_r$$
$$+\left[\frac{\mu_0 I}{2\pi r}-B_0\sin\varphi\left(1-\frac{R^2}{r^2}\frac{\mu-\mu_0}{\mu+\mu_0}\right)\right]\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.30}$$

旋转对称的三维问题:在柱坐标中,电流形成环流,密度矢量具有形式

$$\boldsymbol{j}=j(r,z)\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.31}$$

由方程(8.2.4),矢量势 $\boldsymbol{A}$ 也只有 $\boldsymbol{e}_\varphi$ 方向的分量,即

$$\boldsymbol{A}=A(r,z)\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.32}$$

因此对旋转对称三维问题,矢量势满足的方程为

$$\nabla^2 A(r,z)-\frac{1}{r^2}A(r,z)=-\mu j(r,z) \tag{8.2.33}$$

即

$$\frac{\partial^2 A}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial A}{\partial r}-\frac{1}{r^2}A+\frac{\partial^2 A}{\partial z^2}=-\mu j \tag{8.2.34}$$

上式为非齐次方程,它的解为特解与齐次方程通解之和,而齐次方程是可分离变量的,令

$$A(r,z)=R(r)Z(z) \tag{8.2.35}$$

代入方程(8.2.34)得到

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}-\left(\frac{1}{r^2}-k^2\right)R=0;\quad \frac{\mathrm{d}^2Z}{\mathrm{d}z^2}-k^2Z=0 \tag{8.2.36}$$

如果电流密度在球坐标中有形式

$$\boldsymbol{j}=j(r,\vartheta)\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.37}$$

矢量势也只有一个分量，即

$$\boldsymbol{A}=A(r,\vartheta)\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.38}$$

于是我们得到球坐标系中旋转对称的三维矢量势方程

$$\nabla^2A(r,\vartheta)-\frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}A(r,\vartheta)=-\mu j(r,\vartheta) \tag{8.2.39}$$

边界条件$(\boldsymbol{A}_2-\boldsymbol{A}_1)\times\boldsymbol{n}=0$和$(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}_f$变成

柱坐标中

$$A_1\big|_{r=R}=A_2\big|_{r=R}$$

$$\left[\frac{1}{\mu_1}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_1)-\frac{1}{\mu_2}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_2)\right]_{r=R}=-k_f \tag{8.2.40}$$

球坐标中

$$A_1\big|_{r=R}=A_2\big|_{r=R}$$

$$\left[\frac{1}{\mu_1}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_1)-\frac{1}{\mu_2}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_2)\right]_{r=R}=-k_f \tag{8.2.41}$$

例 8.2.3 电荷q均匀分布在一个半径为a的电介质球表面，该球围绕某一直径以恒定角速度ω旋转，求磁场分布.

解： 选角速度方向为z方向，面电流密度为

$$\boldsymbol{k}_f=\sigma\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}=\frac{q\omega}{4\pi a}\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.42}$$

显然是一个旋转对称问题，球内、外矢量势$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{A}_1(r,\vartheta)\boldsymbol{e}_\varphi$和$\boldsymbol{A}_2=A_2(r,\vartheta)\boldsymbol{e}_\varphi$满足的方程为

$$\nabla^2A-\frac{A}{r^2\sin\vartheta}=0;\quad \nabla\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{8.2.43}$$

边界条件为

$$A_1\big|_{r=a}=A_2\big|_{r=a}$$

$$\left[\frac{1}{\mu_2}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_2)-\frac{1}{\mu_1}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_1)\right]_{r=a}=-\frac{q\omega}{4\pi a}\sin\vartheta \tag{8.2.44}$$

$$A_2\big|_{r\to\infty}=0;\quad A_1\big|_{r=0}<\infty \tag{8.2.45}$$

设通解有形式$A=R(r)\sin\vartheta$，代入方程(8.3.43)得到

$$r^2\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2}+2r\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}-2R=0 \tag{8.2.46}$$

上式为齐次 Euler 方程，根据边界条件式(8.2.45)，取

$$R_1(r) = d_1 r (r < a); \quad R_2(r) = \frac{d_2}{r^2}(r > a) \tag{8.2.47}$$

故解为

$$A_1(r,\vartheta) = d_1 r \sin\vartheta (r < a); \quad A_2(r,\vartheta) = \frac{d_2}{r^2}\sin\vartheta (r > a) \tag{8.2.48}$$

设 $\mu_1 = \mu_2 = \mu_0$，代入式(8.2.44)得到

$$d_1 = \frac{\mu_0 q\omega}{12\pi a}; \quad d_2 = \frac{\mu_0 q\omega a^2}{12\pi} \tag{8.2.49}$$

故矢量势为

$$\boldsymbol{A}_1 = \frac{\mu_0 m}{4\pi}\frac{r}{a^3}\sin\vartheta \boldsymbol{e}_\varphi; \quad \boldsymbol{A}_2 = \frac{\mu_0 m}{4\pi}\frac{\sin\vartheta}{r^2}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{8.2.50}$$

其中磁矩 $\boldsymbol{m} = q\omega a^2 \boldsymbol{e}_z/3$. 最后由 $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ 得到磁场

$$\boldsymbol{B}_1 = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{2}{a^2}\boldsymbol{m}; \quad \boldsymbol{B}_2 = \frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{3\boldsymbol{r}(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})}{r^5} - \frac{\boldsymbol{m}}{r^3}\right] \tag{8.2.51}$$

由例 7.1.2，球外相当于磁偶极子产生的场，而球内是 z 方向的均匀场.

磁标量势：本节最后介绍一下磁标量势概念. 对本构关系 $\boldsymbol{B} = \mu\boldsymbol{H}$ 成立的磁介质(顺磁或抗磁介质)，Maxwell 方程组为 $\nabla\cdot\boldsymbol{H} = 0$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{H} = \boldsymbol{j}$，或者 $\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{B} = \boldsymbol{j}/\mu$. 根据 $\nabla\cdot\boldsymbol{H} = 0$ 或 $\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0$ 可以定义矢量势. 对铁磁介质 $\boldsymbol{B} = \mu\boldsymbol{H}$ 已不成立，必须直接从 $\boldsymbol{H}$ 的定义

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{B}/\mu_0 - \boldsymbol{M} \tag{8.2.52}$$

出发讨论. 由介质中的 Maxwell 方程组 $\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{H} = \boldsymbol{j}$，如果用(8.2.52)式消去 $\boldsymbol{H}$，则得到方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla\times\boldsymbol{B} = \mu_0(\boldsymbol{j} + \nabla\times\boldsymbol{M}) \tag{8.2.53}$$

如果消去 $\boldsymbol{B}$，则得到方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{H} = -\nabla\cdot\boldsymbol{M}; \quad \nabla\times\boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} \tag{8.2.54}$$

方程(8.2.53)和(8.2.54)意义是不同的：前者 $\boldsymbol{B}$ 可以定义矢量势，而 $\boldsymbol{j}_m \equiv \nabla\times\boldsymbol{M}$ 作为电流源出现，为分子电流；而后者与静电场方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{D} = \rho$ 比较，$\rho_m = -\nabla\cdot\boldsymbol{M}$ 相当于电荷密度的角色，称为"磁荷". 如果铁磁介质内无传导电流($\boldsymbol{j} = 0$)，那么式(8.2.54)与静电场方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{E} = \rho/\varepsilon$ 和 $\nabla\times\boldsymbol{E} = 0$ 完全一样，故可以定义标量势 $\boldsymbol{H} = -\nabla\psi$. 但是由 ψ 定义的场应该是一个保守场，而 $\boldsymbol{H}$ 不是一个保守场，它的回路积分由式(7.3.21)的第二个方程给出

$$\oint_L \boldsymbol{H}\cdot d\boldsymbol{l} = \oint_S \boldsymbol{j}\cdot d\boldsymbol{S} \tag{8.2.55}$$

如果空间存在电流环(尽管铁磁介质内无传导电流，不能保证空间其他地方也没有)，而积分回路穿过电流环，那么回路积分就不为零，因而 $\boldsymbol{H}$ 不是一个保守场，无法定义势函数. 为了能够定义标量势(称为**磁标量势**)ψ，必须假定在所考虑的空间

没有电流环,或者如果存在电流环,把它作为边界面来处理.引进磁标量势 ψ 后,静磁场问题与静电场就基本一样了

$$\nabla^2\psi = -\rho_{\mathrm{m}}, \quad \rho_{\mathrm{m}} = -\nabla\cdot\boldsymbol{M} \tag{8.2.56}$$

边界条件:由 $(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)\times\boldsymbol{n}=0$ 和 $(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)\cdot\boldsymbol{n}=0$ 得到

$$\psi_1 = \psi_2; \quad \frac{\partial\psi_1}{\partial n} - \frac{\partial\psi_2}{\partial n} = \boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{M}_1 - \boldsymbol{M}_2) = \sigma_{\mathrm{m}} \tag{8.2.57}$$

其中 σ_{m} 称为**磁荷面密度**.所以一旦给出了介质的磁化强度 $\boldsymbol{M}$,就可以求空间的磁场分布.分两种情况讨论上式中的第二个方程

(1) 非铁磁介质:由 $(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)\cdot\boldsymbol{n}=0$ 得到

$$\mu_1\frac{\partial\psi_1}{\partial n} - \mu_2\frac{\partial\psi_2}{\partial n} = 0 \tag{8.2.58}$$

(2) 理想铁磁体:设固有磁化强度为 $\boldsymbol{M}_0$,诱导磁化强度为 $\boldsymbol{M}'$,存在关系

$$\begin{aligned}\boldsymbol{M} &= \boldsymbol{M}_0 + \boldsymbol{M}' = \boldsymbol{M}_0 + \chi_{\mathrm{m}}\boldsymbol{H}\\ \boldsymbol{B} &= \mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M}) = \mu_0(1+\chi_{\mathrm{m}})\boldsymbol{H} + \mu_0\boldsymbol{M}_0\\ &= \mu\boldsymbol{H} + \mu_0\boldsymbol{M}_0\end{aligned} \tag{8.2.59}$$

于是由 $(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)\cdot\boldsymbol{n}=0$ 得到

$$\mu_1\frac{\partial\psi_1}{\partial n} - \mu_2\frac{\partial\psi_2}{\partial n} = \mu_0\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{M}_{01} - \boldsymbol{M}_{02}) \tag{8.2.60}$$

注意:得到(8.2.60)式,已利用了理想铁磁体的关系式(8.2.59),因此方程(8.2.57)比(8.2.60)式更一般.

例 8.2.4 半径为 a 的均匀磁化球,磁化强度矢量为 $\boldsymbol{M}_0$,求空间磁场分布.

解: 设 $\boldsymbol{M}_0$ 方向为 z 方向,由于球均匀磁化,磁荷 $\rho_{\mathrm{m}} = -\nabla\cdot\boldsymbol{M}_0 = 0$,磁荷分布在球面上

$$\sigma_{\mathrm{m}} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{M}_0 = M_0\cos\vartheta \tag{8.2.61}$$

设球内、外磁标势分别为 ψ_1 和 ψ_2,它们满足 Laplace 方程.边界条件为

$$\begin{aligned}&\psi_1|_{r=a} = \psi_2|_{r=a}\\ &\left.\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\right|_{r=a} - \left.\frac{\partial\psi_1}{\partial r}\right|_{r=a} = -\sigma_{\mathrm{m}} = -M_0\cos\vartheta\end{aligned} \tag{8.2.62}$$

$$\psi_2|_{r\to\infty} = 0; \quad \psi_1|_{r=0} < \infty \tag{8.2.63}$$

根据边界条件式,取球内、外磁标势分别为

$$\psi_1(r,\vartheta) = Ar\cos\vartheta; \quad \psi_2(r,\vartheta) = \frac{B}{r^2}\cos\vartheta \tag{8.2.64}$$

代入边界条件式(8.2.62)得到

$$A = \frac{1}{3}M_0; \quad B = \frac{1}{3}M_0a^3 \tag{8.2.65}$$

故球内、外磁标势分别为

$$\psi_1(r,\vartheta) = \frac{1}{3}M_0 r\cos\vartheta;\quad \psi_2(r,\vartheta) = \frac{1}{3}M_0 a^3\,\frac{\cos\vartheta}{r^2} \tag{8.2.66}$$

相应的磁场强度为

$$\boldsymbol{H} = -\nabla\psi_1 = -\frac{1}{3}M_0\boldsymbol{e}_z;\quad \boldsymbol{H} = -\nabla\psi_2 = \frac{1}{4\pi}\left[\frac{3\boldsymbol{r}(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})}{r^5} - \frac{\boldsymbol{m}}{r^3}\right] \tag{8.2.67}$$

其中 $\boldsymbol{m}$ 是磁化球的磁矩 $\boldsymbol{m}=4\pi a^3\boldsymbol{M}_0/3$. 如果忽略磁化球产生的磁场对原来磁化强度的影响,那么 $\boldsymbol{B}=\mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M})\approx\mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M}_0)$. 于是球内、外的磁感应强度为

$$\boldsymbol{B}_1 = \mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M}_0) = \mu_0\left(-\frac{1}{3}\boldsymbol{M}_0+\boldsymbol{M}_0\right) = \frac{2}{3}\mu_0\boldsymbol{M}_0$$

$$\boldsymbol{B}_2 = \mu_0\boldsymbol{H} = \frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{3\boldsymbol{r}(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})}{r^5} - \frac{\boldsymbol{m}}{r^3}\right] \tag{8.2.68}$$

图 8.2.1 画出了矢量 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的场线,可见:矢量 $\boldsymbol{B}$ 在球面上连续,而矢量 $\boldsymbol{H}$ 不连续,这是由于球表面存在磁荷,矢量 $\boldsymbol{H}$ 的场线从球面上的正磁荷出发终止于球面上的负磁荷.

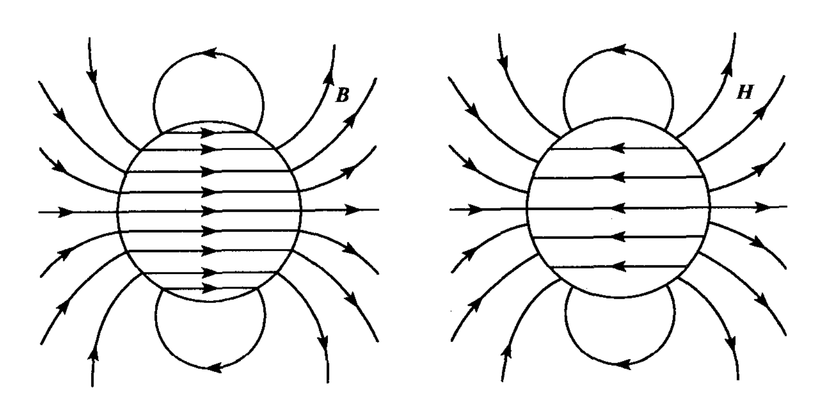


图 8.2.1　矢量 $\boldsymbol{B}$ 的 $\boldsymbol{H}$ 的场线

8.3　多极展开和多极矩与外场的相互作用

电多极展开:首先讨论电多极展开,求远场的电势分布. 设电荷分布在坐标原点附近,即场点与原点的距离远大于源的线度 $|\boldsymbol{r}|\gg|\boldsymbol{r}'|$. 于是可以利用展开关系

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \frac{1}{|\boldsymbol{r}|} - \boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}|} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}|} + \cdots \tag{8.3.1}$$

代入式(7.1.8)

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\rho(\boldsymbol{r}')\left[\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}-\boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}+\frac{1}{2!}\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}+\cdots\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{8.3.2}$$

令

$$q=\int_V\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}';\quad \boldsymbol{p}=\int_V\boldsymbol{r}'\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}';\quad \boldsymbol{Q}=3\int_V\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}'\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{8.3.3}$$

显然 q 是区域内的总电荷，$\boldsymbol{p}$ 是电偶极矩矢量，$\boldsymbol{Q}$ 称为**电四极矩张量**. 电势的级数表达式为

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}|}-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\boldsymbol{p}\cdot\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{6}\boldsymbol{Q}:\nabla\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}\right)+\cdots \tag{8.3.4}$$

上式第二项与式(7.1.13)完全一样；第三项为电四极子的势，写成分量的形式为

$$\varphi_4(\boldsymbol{r})\equiv\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{6}\sum_{i,j=1}^{3}Q_{ij}\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}\right) \tag{8.3.5}$$

球谐函数展开：多极展开也可以用球谐函数进行. 利用 Legendre 函数的母函数公式

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{1}{\sqrt{r^2+r'^2-2rr'\cos\Theta}}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{r}\left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos\Theta) \tag{8.3.6}$$

以及 Legendre 函数的加法定理

$$P_l(\cos\Theta)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}^*(\vartheta',\varphi')Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{8.3.7}$$

其中 Θ 是位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{r}'$ 之间的夹角. (8.3.6)和(8.3.7)式代入式(7.1.8)得到

$$\begin{aligned}\varphi(\boldsymbol{r})&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{l,m}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}\left[\int Y_{lm}^*(\vartheta',\varphi')r'^l\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right]\frac{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}{r^{l+1}}\\&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{l,m}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}q_{lm}\frac{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}{r^{l+1}}\end{aligned} \tag{8.3.8}$$

其中 $\boldsymbol{r}'=(r',\vartheta',\varphi')$ 和 $\boldsymbol{r}=(r,\vartheta,\varphi)$ 分别是源点和场点的坐标，q_{lm} 为多极矩

$$q_{lm}=\int Y_{lm}^*(\vartheta',\varphi')r'^l\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{8.3.9}$$

上式实际上是多极矩展开在球坐标中的表示. 与式(8.3.3)的关系为

$$q_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\int\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}q$$

$$q_{10}=\int Y_{10}^*(\vartheta',\varphi')r'\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\int z'\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}p_z$$

$$q_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\int(x'-\mathrm{i}y')\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(p_x-\mathrm{i}p_y)$$

$$q_{20}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\int(3z'^2-r'^2)\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}Q_{33}$$

$$q_{21}=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\int z'(x'-\mathrm{i}y')\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=-\frac{1}{3}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(Q_{13}-\mathrm{i}Q_{23})$$

$$q_{22}=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\int(x'-\mathrm{i}y')^2\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{1}{12}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}(Q_{11}-2\mathrm{i}Q_{12}-Q_{22})$$

例 8.3.1　二维电多极子展开.

解:　二维电荷分布可用与 z 方向无关的电荷密度 $\rho(\boldsymbol{r})=\rho(x,y)$ 来表示. 二维 Green 函数为

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=-\frac{\ln|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{2\pi\varepsilon_0}\tag{8.3.10}$$

故电荷线密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ 产生的电势为

$$\varphi(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_S 2\rho(\boldsymbol{r}')\ln|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\,\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'\tag{8.3.11}$$

利用关系

$$\begin{aligned}\ln|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|&=\ln r\sqrt{1+\frac{r'^2}{r^2}-2\frac{r'}{r}\cos\beta}\\&=\ln r+\frac{1}{2}\ln\left(1+\frac{r'^2}{r^2}-2\frac{r'}{r}\cos\beta\right)\end{aligned}\tag{8.3.12}$$

其中 β 是 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{r}'$ 的夹角. 当 $\rho(\boldsymbol{r}')$ 分布在原点周围，$r'/r<1$，利用展开

$$\ln(1+x^2-2x\cos\beta)=-2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos n\beta}{n}x^n\quad(x<1)\tag{8.3.13}$$

得到

$$\ln|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|=\ln r-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos n\beta}{n}\left(\frac{r'}{r}\right)^n\tag{8.3.14}$$

因为 $\cos n\beta=\cos n(\varphi-\varphi')=\cos n\varphi\cos n\varphi'+\sin n\varphi\sin n\varphi'$（其中 φ 和 φ' 分别是 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{r}'$ 的极角)，因此

$$\begin{aligned}\varphi(\boldsymbol{r})&=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_S 2\rho(\boldsymbol{r}')\left[\ln r-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos n\beta}{n}\left(\frac{r'}{r}\right)^n\right]\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'\\&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[-2q\ln r+2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{Q_n^{\mathrm{c}}\cos n\varphi+Q_n^{\mathrm{s}}\sin n\varphi}{nr^n}\right]\end{aligned}\tag{8.3.15}$$

其中

$$\begin{aligned}&q=\int\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}';\quad Q_n^{\mathrm{c}}=\int\rho(\boldsymbol{r}')r'^n\cos n\varphi'\,\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'\\&Q_n^{\mathrm{s}}=\int\rho(\boldsymbol{r}')r'^n\sin n\varphi'\,\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}'\end{aligned}\tag{8.3.16}$$

Q_n^{c} 和 Q_n^{s} 就是二维 n 级多极矩，取 $n=1$ 时，得到二维偶极子的电势

$$\varphi_p(\boldsymbol{r})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{r^2}\tag{8.3.17}$$

其中二维偶极子为

$$\boldsymbol{p}=\int \boldsymbol{r}'\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}' \tag{8.3.18}$$

电偶极矩与外场的相互作用：在电荷连续分布的情况下，由式(8.1.27)得到$\rho(\boldsymbol{r})$与外场φ_e的相互作用能为

$$W=\int \rho(\boldsymbol{r})\varphi_\mathrm{e}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.3.19}$$

因$\rho(\boldsymbol{r})$分布在原点处小的体积内，把φ_e在原点展开

$$\varphi_\mathrm{e}(\boldsymbol{r})=\varphi_\mathrm{e}(0)+\boldsymbol{r}\cdot(\nabla\varphi_\mathrm{e})\mid_{r=0}+\frac{1}{2}\boldsymbol{rr}:(\nabla\nabla\varphi_\mathrm{e})\mid_{r=0}+\cdots \tag{8.3.20}$$

代入式(8.3.19)得到

$$\begin{aligned}W&=\varphi_\mathrm{e}(0)\int\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}+\int\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\cdot(\nabla\varphi_\mathrm{e})\mid_{r=0}\\&\quad+\frac{1}{2}\int\boldsymbol{rr}\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}:(\nabla\nabla\varphi_\mathrm{e})\mid_{r=0}+\cdots\\&=q\varphi_\mathrm{e}(0)-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e}+\frac{1}{6}\boldsymbol{Q}:(\nabla\nabla\varphi_\mathrm{e})\mid_{r=0}+\cdots\end{aligned} \tag{8.3.21}$$

显然上式第一项表示电荷与外场的相互作用能；第三项为电四极矩与外场的相互作用能；而第二项为电偶极子与外场$\boldsymbol{E}_\mathrm{e}=-\nabla\varphi_\mathrm{e}$的相互作用能

$$W_\mathrm{p}=-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e} \tag{8.3.22}$$

只要知道了相互作用能，利用虚功原理就可以求出电偶极子在外场中受的力$\boldsymbol{F}$和力矩$\boldsymbol{M}$. 设电偶极子有一个虚位移$\delta\boldsymbol{r}$，则力$\boldsymbol{F}$作功等于相互作用能减少，即

$$\boldsymbol{F}\cdot\delta\boldsymbol{r}=-\delta W_\mathrm{p}=\nabla(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e})\cdot\delta\boldsymbol{r} \tag{8.3.23}$$

故

$$\boldsymbol{F}=\nabla(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e})=(\boldsymbol{p}\cdot\nabla)\boldsymbol{E}_\mathrm{e} \tag{8.3.24}$$

注意：$\boldsymbol{p}$是常矢量. 同样，设电偶极子有一个虚转动$\delta\boldsymbol{A}$，则力矩$\boldsymbol{M}$做功，相互作用能减少，即

$$\boldsymbol{M}\cdot\delta\boldsymbol{A}=-\delta W_\mathrm{p}=\delta(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e})=\delta\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e} \tag{8.3.25}$$

电偶极子的大小不变化，仅转动方向，故$\delta\boldsymbol{p}=\delta\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p}$，代入上式

$$\boldsymbol{M}\cdot\delta\boldsymbol{A}=(\delta\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{E}_\mathrm{e}=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{E}_\mathrm{e})\cdot\delta\boldsymbol{A} \tag{8.3.26}$$

即

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{E}_\mathrm{e} \tag{8.3.27a}$$

上式也可直接由力矩的定义得到

$$\boldsymbol{M}=\int\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int\boldsymbol{r}\times[\rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}_\mathrm{e}]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{E}_\mathrm{e} \tag{8.3.27b}$$

磁多极展开：与以上讨论电多极展开类似，设电流密度分布在坐标原点附近，求远场的磁势分布. 由式(7.1.24)和(8.3.1)，我们有

$$A(r) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V j(r')\left[\frac{1}{|r|} - r' \cdot \nabla \frac{1}{|r|} + \frac{1}{2!}r'r' : \nabla\nabla \frac{1}{|r|} + \cdots\right]d^3r' \tag{8.3.28}$$

首先看第一项

$$A_0(r) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V j(r')d^3r' \tag{8.3.29}$$

因为是稳定电流分布，上式积分恒为零，这表明磁场多极展开不含有类似于点电荷的磁单极项. 再看第二项

$$\begin{aligned} A_1(r) &= -\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V j(r')\left(r' \cdot \nabla \frac{1}{|r|}\right)d^3r' = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{1}{|r|^3}r \cdot \int_V r'j(r')d^3r' \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{1}{|r|^3}r \cdot \left[\int_V \frac{1}{2}(r'j + jr')d^3r' \right. \\ &\quad \left. + \int_V \frac{1}{2}(r'j - jr')d^3r'\right] \end{aligned} \tag{8.3.30}$$

利用矢量恒等式

$$\nabla' \cdot (jr'r') = (\nabla' \cdot j)r'r' + jr' + r'j \tag{8.3.31}$$

以及稳恒电流条件$\nabla' \cdot j = 0$，式(8.3.30)中第一项可化成面积分，而电流只在小区域存在，于是面积分为零. 因此

$$\begin{aligned} A_1(r) &= \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{1}{|r|^3}\int_V \frac{1}{2}[(r \cdot r')j - (r \cdot j)r']d^3r' \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{1}{|r|^3}\left[\int_V \frac{1}{2}(r' \times j)d^3r'\right] \times r \end{aligned} \tag{8.3.32a}$$

其中利用了矢量恒等式

$$(r \cdot r')j - (r \cdot j)r' = (r' \times j) \times r \tag{8.3.32b}$$

令

$$m = \frac{1}{2}\int_V r' \times j(r')d^3r' \tag{8.3.33}$$

称为**磁偶极矩**，则矢量势展开的第二项为

$$A_1(r) = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{m \times r}{|r|^3} \tag{8.3.34}$$

显然上式与式(7.1.37)是相同的. 对线电流，$j d^3 r$ 用 $I dl$ 来代替，即

$$m = \frac{I}{2}\oint_C r' \times dl \tag{8.3.35}$$

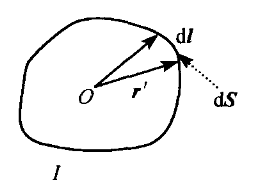


图 8.3.1　任意闭合电流回路

例 8.3.2　求平面上一任意形状闭合电流回路的磁矩.

解:　如图 8.3.1,图中面积元为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{r}' \times \mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{8.3.36}$$

于是

$$\boldsymbol{m} = \frac{I}{2}\oint_C \boldsymbol{r}' \times \mathrm{d}\boldsymbol{l} = I\boldsymbol{S} \tag{8.3.37}$$

磁偶极矩与外场的相互作用:电流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ 在外磁场 $\boldsymbol{B}_e$ 中受的力为

$$\boldsymbol{F} = \int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}') \times \boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{8.3.38}$$

因 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')$ 分布在原点处小的体积内,把 $\boldsymbol{B}_e$ 在原点展开得到

$$\boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r}') = \boldsymbol{B}_e(0) + \boldsymbol{r}' \cdot (\nabla \boldsymbol{B}_e)\,|_{r'=0} + \cdots \tag{8.3.39}$$

代入式(8.3.38)得到

$$\boldsymbol{F} = \int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{B}_e(0) + \int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}') \times [\boldsymbol{r}' \cdot (\nabla \boldsymbol{B}_e)\,|_{r'=0}]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{8.3.40}$$

第一项积分为零,第二项记 $(\nabla \boldsymbol{B}_e)\,|_{r'=0} = \nabla \boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r})$. 设产生外磁场的电流源不在原点附近,在积分区域内 $\nabla \times \boldsymbol{B}_e = 0$,故

$$\boldsymbol{r}' \times (\nabla \times \boldsymbol{B}_e) = \nabla(\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{B}_e) - (\boldsymbol{r}' \cdot \nabla)\boldsymbol{B}_e = 0 \tag{8.3.41}$$

代入式(8.3.40)得到

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F} &= \int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}') \times [\boldsymbol{r}' \cdot \nabla \boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}') \times \nabla [\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\
&= -\nabla \times \int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')[\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = -\nabla \times \sum_{\sigma=1}^{3}\int \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')r'_\sigma B_{e\sigma}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\
&= -\nabla \times \sum_{\sigma=1}^{3} B_{e\sigma}\,\frac{1}{2}\left[\int (\boldsymbol{j}r'_\sigma + j_\sigma \boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' + \int (\boldsymbol{j}r'_\sigma - j_\sigma \boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right]
\end{aligned} \tag{8.3.42}$$

利用矢量恒等式(8.3.31)和稳恒电流条件 $\nabla' \cdot \boldsymbol{j} = 0$,上式第一项体积分化成面积分而为零,于是

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{F} &= -\nabla \times \sum_{\sigma=1}^{3} B_{e\sigma}\,\frac{1}{2}\left[\int (\boldsymbol{j}r'_\sigma - j_\sigma \boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right] \\
&= -\nabla \times \left[\frac{1}{2}\int (\boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{j}) \times \boldsymbol{B}_e\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right] = -\nabla \times (\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{B}_e)
\end{aligned} \tag{8.3.43}$$

其中已利用了恒等式 $(\boldsymbol{B}_e \cdot \boldsymbol{r}')\boldsymbol{j} - (\boldsymbol{B}_e \cdot \boldsymbol{j})\boldsymbol{r}' = (\boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{j}) \times \boldsymbol{B}_e$. 于是磁偶极子在外场中受到的力为

$$\boldsymbol{F} = -\nabla \times (\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{B}_e) = (\boldsymbol{m} \cdot \nabla)\boldsymbol{B}_e = \nabla(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}_e) \tag{8.3.44}$$

注意:$\boldsymbol{m}$ 是常矢量.

通过类似的推导可以得到磁偶极子在外场中受到的力矩为

$$\boldsymbol{M} = \int \boldsymbol{r}' \times [\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}') \times \boldsymbol{B}_e(\boldsymbol{r}')] \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{B}_e \tag{8.3.45}$$

当磁偶极子有一虚位移时，力 $\boldsymbol{F}$ 做功等于体系能量的减少

$$-\delta u = \boldsymbol{F} \cdot \delta \boldsymbol{r} = \nabla(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}_e) \cdot \delta \boldsymbol{r} = \delta(\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}_e) \tag{8.3.46}$$

故体系的能量为

$$u = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}_e \tag{8.3.47}$$

称为磁偶极子在外场中的**有效势能**. 当磁偶极子与外场同一方向时，$u=-mB_e$ 极小，反向时，$u=mB_e$ 极大，故也称 u 为**取向能**. 注意：有效势能不是相互作用能，相互作用能应由式(8.2.13d)决定

$$U_m = \int \boldsymbol{A}_e \cdot \boldsymbol{j} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{8.3.48}$$

不难证明 $U_m = \boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}_e$，即有效势能与相互作用能反号.

8.4　准静态场和场的扩散

当空间电荷密度和电流密度随时间变化比较缓慢时，激发的电场和磁场随时间也较缓慢. 每一时刻，源和场之间的关系类似于静态场的源和场的关系，故称为**准静态场**. 对准静态场，Maxwell 方程组中可以忽略位移电流项.

首先讨论可忽略位移电流的条件. 导电体中的电流可分为两部分，即传导电流 $\boldsymbol{j}_c = \sigma \boldsymbol{E}$ 和位移电流 $\boldsymbol{j}_d = \varepsilon \partial \boldsymbol{E}/\partial t$. 设电场随时间的变化为

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \exp(-\mathrm{i}\omega t) \tag{8.4.1}$$

显然位移电流与传导电流之比大大小于 1 时，就可以忽略位移电流

$$\frac{|\boldsymbol{j}_d|}{|\boldsymbol{j}_c|} = \frac{\varepsilon\omega}{\sigma} \ll 1 \tag{8.4.2}$$

即 $\omega \ll \sigma/\varepsilon$. 对金属，如纯金 $\sigma \sim 10^7\,\Omega/\mathrm{m}$，$\varepsilon \approx \varepsilon_0$，$\omega < 10^{17}\,\mathrm{s}^{-1}$. 因此金属中的场一般可看作准静态场，故我们主要考虑金属导体. 由 Maxwell 方程组，在金属导体外部，忽略位移电流得到准静态场满足的方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho; \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{8.4.3}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} \tag{8.4.4}$$

令 $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \partial\boldsymbol{A}/\partial t$ 和 Coulomb 规范 $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$ 得到

$$\nabla^2\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon}; \quad \nabla^2\boldsymbol{A} = -\mu\boldsymbol{j} \tag{8.4.5}$$

显然准静态场与静电场和静磁场满足同样的方程. 所不同的是，电场 $\boldsymbol{E}$ 不仅与标量势有关，而且与矢量势也有关.

在导体内部 $\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$ 且自由电荷为零，因此场方程为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{8.4.6}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = \sigma \boldsymbol{E} \tag{8.4.7}$$

上两式分别消去 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 得到方程

$$\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} - \frac{1}{\mu\sigma}\nabla^2 \boldsymbol{H} = 0; \quad \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} - \frac{1}{\mu\sigma}\nabla^2 \boldsymbol{E} = 0 \tag{8.4.8}$$

可见在准静态场近似下，导体内部的电场和磁场满足扩散方程.

例 8.4.1 圆柱形导线中的电流分布

解： 设导体内的电场与导线轴平行，且为 z 方向：$\boldsymbol{E}=E\boldsymbol{e}_z$，则

$$\frac{\partial E}{\partial t} - \frac{1}{\mu\sigma}\nabla^2 E = 0 \tag{8.4.9}$$

由问题的对称性，$E=E(r,t)$，与 φ 和 z 无关，并取时间谐振解

$$E(r,t) = E(r)\exp(-\mathrm{i}\omega t) \tag{8.4.10}$$

于是式(8.4.9)简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2 E(r)}{\mathrm{d}r^2} + \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}E(r)}{\mathrm{d}r} + k^2 E(r) = 0 \tag{8.4.11}$$

其中 $k=\sqrt{\mathrm{i}\omega\sigma\mu}=(1+\mathrm{i})\sqrt{\omega\sigma\mu/2}$. 上式为零阶 Bessel 函数，由于 $r\to 0$，电场有限，故上式的解为

$$E(r) = E_0 J_0(kr) \tag{8.4.12}$$

导体中的电流密度为

$$\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E} = E_0 \sigma J_0(kr)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_z \tag{8.4.13}$$

常数由条件

$$\int_0^R E_0 \sigma J_0(kr) 2\pi r \mathrm{d}r = I \tag{8.4.14}$$

决定，其中 R 为导体半径，I 为导体通过的总电流. 不难得到

$$E_0 = \frac{kI}{2\pi R J_1(kR)\sigma} \tag{8.4.15}$$

所以

$$\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E} = \frac{kI}{2\pi R J_1(kR)} J_0(kr)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_z \tag{8.4.16}$$

分两种情况讨论：

(1) $|kR| \ll 1$，即导体很细：$R \ll 1/\sqrt{\omega\sigma\mu}$. 利用渐近关系：

$$J_0(x) \to 1, \quad J_1(x) \to x/2 \quad (x \to 0)$$

得到

$$\boldsymbol{j} = \frac{I}{\pi R^2}\exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_z \tag{8.4.17}$$

上式表示电流在导体中均匀分布；

(2) $|kR|\gg 1$,即导体很粗,$R\gg 1/\sqrt{\omega\sigma\mu}$. 利用渐近关系:

$$J_\nu(x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/2}) = I_\nu(x)\exp\left(\mathrm{i}\frac{\pi\nu}{2}\right)\rightarrow \frac{\exp(x)}{\sqrt{2\pi x}}\exp\left(\mathrm{i}\frac{\pi\nu}{2}\right) \tag{8.4.18}$$

其中 $x\rightarrow\infty$,$I_\nu(x)$是虚宗量 Bessel 函数. 上式代入式(8.4.16)得到

$$\boldsymbol{j}\approx \boldsymbol{e}_z\frac{kI}{2\pi R}\sqrt{\frac{R}{r}}\exp\left[-\left(\frac{R-r}{\delta}\right)\right]\exp\left[-\mathrm{i}\left(\omega t-\frac{R-r}{\delta}+\frac{\pi}{2}\right)\right] \tag{8.4.19}$$

其中 $\delta=\sqrt{2/(\mu\omega\sigma)}$. 上式表明:从表面到轴线,电流是指数衰减的. 在高频情况或理想导体,$\delta\rightarrow 0$,电流基本集中在导体的表面.

习　题　8

8.1　设空间某区域无电荷,证明该空间一点的电势等于以该点为球心的任一球面上电势的平均值.

8.2　一个半径为 R、体内均匀带电 Q、介电常量为 ε 的介质球放在均匀外电场 $\boldsymbol{E}_0$ 中,求空间电势分布.(提示:球内外电势分别满足 Poisson 方程和 Laplace 方程,先求球内一个正比于 r^2 的特解)

答案:

$$\varphi_1=-\frac{(\varepsilon_0+2\varepsilon)Q}{8\pi\varepsilon\varepsilon_0 R}-\frac{Qr^2}{8\pi\varepsilon R^3}-\frac{3\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r};$$

$$\varphi_2=\frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r}-\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r}-\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}R^3\frac{\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r}}{r^3}.$$

8.3　一电荷位于两个均匀无限大电介质的平面分界面上,两边电介质的介电常量分别为 ε_1 和 ε_2,求空间电场的分布.(提示:以电荷为原点,由电场的切向连续条件知道,电场是球对称分布的,设为 $\boldsymbol{E}=A\dfrac{1}{r^2}\boldsymbol{e}_r$. 以原点为圆心,作半径为 r 的球面,在球面上积分 $\iint_S \boldsymbol{D}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=q$,求常量 A)

答案:$\boldsymbol{E}=\dfrac{q}{2(\varepsilon_1+\varepsilon_2)\pi}\dfrac{1}{r^2}\boldsymbol{e}_r$;　$\boldsymbol{D}_1=\dfrac{q\varepsilon_1}{2(\varepsilon_1+\varepsilon_2)\pi}\dfrac{1}{r^2}\boldsymbol{e}_r$;　$\boldsymbol{D}_2=\dfrac{q\varepsilon_2}{2(\varepsilon_1+\varepsilon_2)\pi}\dfrac{1}{r^2}\boldsymbol{e}_r$.

8.4　同轴理想导电薄片做成无限双圆锥($\vartheta_1<\vartheta<\vartheta_2$),内锥面保持电势为 Φ_0,外锥面接地. 求:(1) 两锥面间($\vartheta_1<\vartheta<\vartheta_2$)的电势;(2) 当外锥面为无限大平面时,求平面上的电荷密度.(提示:锥面间的电势与 φ 和 r 无关)

答案:

(1) $\psi(\vartheta)=\Phi_0\dfrac{\ln\tan(\vartheta/2)-\ln\tan(\vartheta_2/2)}{\ln\tan(\vartheta_1/2)-\ln\tan(\vartheta_2/2)}$;

(2) 当 $\vartheta_2=\pi/2$ 时,外锥面为无限大平面

$$\psi(\vartheta) = \Phi_0 \frac{\ln\tan(\vartheta/2)}{\ln\tan(\vartheta_1/2)}$$

$$\sigma = -\varepsilon_0 \left(\frac{\partial\psi}{\partial n}\right)\bigg|_{\vartheta=\pi/2} = \frac{\varepsilon_0}{r}\left(\frac{\partial\psi}{\partial\vartheta}\right)\bigg|_{\vartheta=\pi/2} = \varepsilon_0 \frac{\Phi_0}{r\ln\tan(\vartheta_1/2)}$$

当 $r\to 0$，$\sigma\to\infty$，表示电荷集中在锥点处.

8.5 设电荷密度为

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \frac{er^2}{64\pi a_0^5}\sin^2\vartheta\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

其中 a_0 为常量.(1) 作多极展开，确定所有的多极矩，写出远处的势；(2) 证明在原点附近电势为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\left[\frac{1}{4} - \frac{r^2}{120a_0^2}P_2(\cos\vartheta)\right]$$

(提示：在原点附近不能作多极展开公式，直接由方程(7.1.8)求电势；利用展开公式

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\Theta)$$

其中 $r_<$ 和 $r_>$ 分别表示 r 和 r' 中较小的一个和较大的一个，以及

$$P_l(\cos\Theta) = P_l(\cos\vartheta)P_l(\cos\vartheta') + 2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(\cos\vartheta)P_l^m(\cos\vartheta')\cos[m(\varphi-\varphi')]$$

第二项对积分没有贡献；$\sin^2\vartheta = 2[1-P_2(\cos\vartheta)]/3$；求出积分后再用条件 $r\to 0$ 展开到 r^2 项)

答案：$q_{00} = \dfrac{e}{\sqrt{4\pi}}$；$q_{20} = -3\sqrt{\dfrac{5}{\pi}}ea_0^2$，其余为零

$$\psi(r,\vartheta) = \frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[1 - \frac{6a_0^2}{r^2}P_2(\cos\vartheta)\right].$$

8.6 在零级近似下，He 原子中两个电子都可以看成电子云分布

$$\rho(r) = -\frac{8e}{\pi a_0^3}\exp\left(-4\frac{r}{a_0}\right)$$

求两个电子间的相互作用能.(提示：首先求一个电子云产生的势

$$\psi(r) = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[1 - \left(1+\frac{2r}{a_0}\right)\exp\left(-4\frac{r}{a_0}\right)\right]$$

然后求相互作用能)

答案：$W = \displaystyle\int\rho(r)\psi(r)\,\mathrm{d}\tau = \frac{5e^2}{16\pi\varepsilon_0 a_0}$.

8.7 空间 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 点分别存在两个电偶极矩 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2$. 证明相互作用能

$$W=\frac{\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2-3(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{p}_1)(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{p}_2)}{4\pi\varepsilon_0\mid\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\mid^3}$$

其中 $\boldsymbol{e}$ 为两点连线方向的单位矢量.设两个电偶极矩的大小相等且都指向 z 轴方向,一个位于原点,另一个位于:(1) $\vartheta=\pi/2$,距离原点 r;(2) $\vartheta=0$,距离原点 r.求两种情况下电偶极矩的相互作用能和作用力.

答案:(1) $\vartheta=\pi/2,\boldsymbol{p}_1\parallel\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_1\perp\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}_2\perp\boldsymbol{r}$:

$$W=\frac{p^2}{4\pi\varepsilon_0 r^3};\quad F=-\frac{\partial W}{\partial r}\boldsymbol{e}_r=\frac{3p^2}{4\pi\varepsilon_0 r^5}\boldsymbol{r};$$

(2) $\vartheta=0,\boldsymbol{p}_1\parallel\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_1\parallel\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}_2\parallel\boldsymbol{r}$:

$$W=-\frac{p^2}{2\pi\varepsilon_0 r^3};\quad F=-\frac{\partial W}{\partial r}\boldsymbol{e}_r=-\frac{3p^2}{2\pi\varepsilon_0 r^5}\boldsymbol{r}.$$

8.8　半径为 a 的圆形薄片,电荷密度为 $\sigma=kr$,k 为常量.准确到电四极矩,求该带电体在远处的电势.(提示:由于轴对称分布,电偶极矩为零 $\boldsymbol{p}=0$;由于电荷分布与 z 无关:$D_{13}=D_{23}=D_{33}=D_{12}=0$)

答案:

$$Q=\frac{2}{3}\pi ka^3;\quad D_{11}=D_{22}=\frac{3\pi ka^5}{5};$$

$$\begin{aligned}\psi&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Q}{r}+\frac{1}{24\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j=1}^{3}D_{ij}\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\frac{1}{r}\\&=\frac{ka^3}{6\varepsilon_0 r}+\frac{ka^5}{40\varepsilon_0 r^3}(1-3\cos^2\vartheta).\end{aligned}$$

8.9　写出均匀磁场在直角坐标、柱坐标和球坐标中矢量势的表达式.(提示:利用$\nabla\times(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{r})=2\boldsymbol{a}$,故 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})/2$)

答案:取 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$,直角坐标

$$\boldsymbol{A}=B(x\boldsymbol{e}_y-y\boldsymbol{e}_x)/2\quad 或\quad \boldsymbol{A}=Bx\boldsymbol{e}_y\quad 或\quad \boldsymbol{A}=-By\boldsymbol{e}_x$$

它们相差一个规范变换,见第 10 章讨论;

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}Br\boldsymbol{e}_\varphi(柱坐标);\quad \boldsymbol{A}=\frac{1}{2}Br\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi(球坐标).$$

8.10　电荷 q 均匀分布在一个半径为 R 的电介质球内,该球围绕某一直径以恒定角速度 ω 旋转,求磁场分布.(提示:电流密度 $\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}=\frac{3q\omega}{4\pi R^3}r\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi$,旋转对称的三维问题,用式(8.2.39)求矢量势,球内一个特解为 $A_0=-\frac{3\mu_0 q\omega}{40\pi R^3}r^3\sin\vartheta$.设球内和球外通解分别为

$$A_1=A_0+a_1 r\sin\vartheta(r<R);\quad A_2=\frac{b}{r^2}\sin\vartheta(r>R)$$

边界条件中面电流密度取零,然后求系数)

答案:$\boldsymbol{A}_1=-\dfrac{3\mu_0}{8\pi R^5}r^2\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{r}+\dfrac{5\mu_0}{8\pi R^3}\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{r}$; $\boldsymbol{A}_2=\dfrac{\mu_0}{4\pi}\dfrac{\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{r}}{r^3}$

其中 $\boldsymbol{m}=q\omega R^2\boldsymbol{e}_z/5$.

8.11 上题中考虑 q 均匀分布在表面,用磁标量势法求磁场分布,并且说明球内是一均匀场,球外相当于磁偶极矩产生的场.(提示:表面电流密度为

$$\boldsymbol{\alpha}_f=\sigma\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}=R\sigma\omega\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi$$

等效体电流密度 $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{\alpha}_f\delta(R-r)$,故磁矩为

$$\boldsymbol{m}=\frac{1}{2}\int\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{j}\,\mathrm{d}\tau=\pi R^4\sigma\omega\int_0^\pi\sin^3\vartheta\mathrm{d}\vartheta\boldsymbol{e}_z=\frac{4\pi}{3}R^4\sigma\omega\boldsymbol{e}_z$$

磁化强度

$$\boldsymbol{M}=\frac{\boldsymbol{m}}{4\pi R^3/3}=R\sigma\omega\boldsymbol{e}_z$$

球内外没有传导电流,可用磁标量势法,把表面电流作边界条件处理

$$\psi_1=\psi_2;\quad\left(\frac{\partial\psi_1}{\partial r}-\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\right)\bigg|_{r=R}=\sigma R\omega\cos\vartheta)$$

答案:$\psi_1(r,\vartheta)=\dfrac{1}{3}\sigma R\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}$;$\psi_2(r,\vartheta)=\dfrac{1}{3}\sigma R^4\dfrac{\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r}}{r^2}$;

$$\boldsymbol{B}_1=\mu_0(\boldsymbol{H}_1+\boldsymbol{M})=\mu_0(-\nabla\psi_1+\boldsymbol{M})=\frac{2}{3}\mu_0\sigma R\omega\boldsymbol{e}_z$$

$$\boldsymbol{B}_2=\mu_0\boldsymbol{H}_2=-\mu_0\nabla\psi_2=\frac{1}{3}\mu_0\sigma R^3\omega\left[\frac{3(\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{r})}{r^5}\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{\omega}}{r^3}\right]$$

$$=\frac{1}{3}\mu_0\sigma\omega\frac{R^4}{r^3}(3\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{e}_z)$$

利用 $\boldsymbol{e}_z=\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r-\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta$

$$\boldsymbol{B}_2=\frac{\mu_0\sigma\omega R^4}{3r^3}(2\cos\vartheta\boldsymbol{e}_r+\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta)$$

由例 7.1.2,这是取向为 z 方向的磁偶极矩产生的场.

8.12 两个半径为 R 的圆形线圈,通过的电流均为 I. 当它们相距 $L(L\gg R)$,并且它们的轴线相互平行,电流方向相同. 求:(1) 两线圈作用的力矩;(2) 相互作用能;(3) 相互作用力.(提示:可看成两个磁偶极矩的相互作用,求线圈 1 对线圈 2 的作用时,首先求出线圈 1 在线圈 2 处的磁场)

答案:假定两线圈的轴线在 z 方向,轴线与两线圈的连线夹角为 ϑ.

$$\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{m}_2\times\boldsymbol{B}_1=-\frac{3\pi\mu_0I^2R^4}{4L^3}\sin\vartheta\cos\vartheta\boldsymbol{e}_x;$$

$$U = \boldsymbol{m}_2 \cdot \boldsymbol{B}_1 = \frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{3(\boldsymbol{m}_2 \cdot \boldsymbol{r}) \cdot (\boldsymbol{m}_1 \cdot \boldsymbol{r})}{r^3} - \frac{\boldsymbol{m}_2 \cdot \boldsymbol{m}_1}{r^3}\right]$$

线圈 2 受到线圈 1 的作用力

$$\boldsymbol{F}_{21} = -\nabla U = \frac{\pi\mu_0 I^2 R^4}{4L^2}\left[(9\cos\vartheta - 15\cos^3\vartheta)\boldsymbol{e}_z + (3 - 15\cos^2\vartheta)\sin\vartheta\boldsymbol{e}_y\right]$$

同样可得线圈 1 对线圈 2 的作用力 $\boldsymbol{F}_{12} = -\boldsymbol{F}_{21}$，可见符合牛顿第三定律，但作用力的方向不在线圈的连线上.

第 9 章　电磁波的传播

Maxwell 从 Maxwell 方程组成功预言电磁场以波动形式传播，其速度为光速. 现在我们知道从 X-光、紫外光到远红外光，都是电磁波，不过是频率不同而已. 本章介绍无限大均匀介质中的平面波、电磁波在平面界面的反射和折射、各向异性介质中的电磁波、等离子体中电磁波的传播特性，以及电磁波在波导中的传播.

9.1　无限大均匀介质中的平面波和波的偏振

非导电介质: 首先考虑无限大、均匀的非导电介质，如果不存在源($\rho=0, \boldsymbol{j}=0$)，则 Maxwell 方程组为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{9.1.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{H} = \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} \tag{9.1.2}$$

其中非导电介质的本构方程为 $\boldsymbol{D}=\varepsilon \boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}=\mu \boldsymbol{H}$ 且假定 ε 和 μ 为常数. 方程(9.1.1)第二式两边取旋度，并利用本构方程和方程(9.1.2)第二式，得到

$$\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{E} = \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{E}) - \nabla^2 \boldsymbol{E} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \boldsymbol{H} = -\mu\varepsilon \frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} \tag{9.1.3}$$

再利用方程(9.1.1)第一式和本构方程得

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0 \tag{9.1.4}$$

其中 $c=1/\sqrt{\mu\varepsilon}$ 为介质中的光速. 类似的过程可以给出

$$\nabla^2 \boldsymbol{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{B}}{\partial t^2} = 0 \tag{9.1.5}$$

方程(9.1.4)和(9.1.5)的平面波解为

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)]; \quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_0 \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{9.1.6}$$

其中波数 $k=\omega/c$. 由方程 $\nabla \cdot \boldsymbol{D}=0$ 和 $\nabla \cdot \boldsymbol{B}=0$ 得

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{E}_0 = 0; \quad \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{B}_0 = 0 \tag{9.1.7}$$

因此波的传播方向与电场和磁场方向垂直，说明电磁波是横波. 由方程(9.1.1)第二式得

$$\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{E}_0 = \omega \boldsymbol{B}_0 \tag{9.1.8}$$

说明电场和磁场不是相互独立的，$\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 组成右手定则.

注意到能流 $\boldsymbol{S}_e=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$ 是非线性的运算，故式(9.1.6)必须取实部，而且我们对平均能流感兴趣，于是

$$\langle \boldsymbol{S}_e\rangle = \langle \mathrm{Re}\boldsymbol{E}\times\mathrm{Re}\boldsymbol{H}\rangle = \frac{1}{T}\int_0^T \boldsymbol{S}_e \mathrm{d}t \tag{9.1.9}$$

利用公式：$\langle \mathrm{Re}\boldsymbol{E}\times\mathrm{Re}\boldsymbol{H}\rangle=\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^*\times\boldsymbol{H})/2$，平均能流为

$$\langle \boldsymbol{S}_e\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^*\times\boldsymbol{H}) \tag{9.1.10}$$

对平面波

$$\langle \boldsymbol{S}_e\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}}E_0^2\boldsymbol{e}_k \tag{9.1.11}$$

其中 $\boldsymbol{e}_k$ 是传播方向 $\boldsymbol{k}$ 的单位矢量. 如果令 $\varepsilon=\varepsilon_0$ 和 $\mu=\mu_0$，上述结果完全可应用于电磁波在真空的传播.

导电介质：导电介质与非导电介质的主要区别在于，前者存在自由电子，只要有电磁波在其中传播，就会引起传导电流 $\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}$，而且在频率较低时，导电介质中电荷密度 $\rho=0$. 事实上，由电荷连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sigma\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\sigma}{\varepsilon}\rho=0 \tag{9.1.12}$$

即

$$\rho=\rho_0\exp\left(-\frac{\sigma}{\varepsilon}t\right) \tag{9.1.13}$$

一般 $\sigma\sim10^7\,\mathrm{S/m}$，真空中介电常数为 $\varepsilon_0=8.85\times10^{-12}\,\mathrm{F/m}$，$\sigma/\varepsilon\sim10^{18}\,\mathrm{s}^{-1}$，故在电磁波频率不太高时，基本可认为 $\rho=0$ 成立. 因此导电介质的 Maxwell 方程组为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{9.1.14}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{H}=\sigma\boldsymbol{E}+\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t} \tag{9.1.15}$$

利用消元法，可得到导电介质的电磁波方程为

$$\nabla^2\boldsymbol{E}-\sigma\mu\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2}=0 \tag{9.1.16}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{B}-\sigma\mu\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{B}}{\partial t^2}=0 \tag{9.1.17}$$

上述方程比方程(9.1.4)和(9.1.5)多一项时间的一阶导数项，表示电磁能量的损耗，是不可逆过程. 仍然假定平面波解，即方程(9.1.6)的形式，代入方程(9.1.16)和(9.1.17)

$$-k^2+\mathrm{i}\sigma\mu\omega+\varepsilon\mu\omega^2=0 \tag{9.1.18}$$

可见 k 是复数. 上式改写成

$$k^2 = \mu\omega^2\left(\varepsilon + \mathrm{i}\,\frac{\sigma}{\omega}\right) = \mu\omega^2\varepsilon'(\omega) \tag{9.1.19}$$

其中 $\varepsilon'(\omega)=\varepsilon+\mathrm{i}\sigma/\omega$ 称为**复介电常数**，反映了介质的极化和传导两个方面. 令 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{\beta}+\mathrm{i}\boldsymbol{\alpha}$，显然 $\boldsymbol{\alpha}$ 表示波的衰减. 由方程(9.1.19)

$$\beta^2-\alpha^2 = \omega^2\varepsilon\mu; \quad \boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\alpha} = \frac{\omega}{2}\mu\sigma \tag{9.1.20}$$

一般 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的方向不一致，只有在垂直金属平面(见 9.2 节)入射时，$\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的方向一致. 考虑这种情况，于是可得

$$\beta = \omega\sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{2}}\left(\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon^2}}+1\right)^{1/2}; \quad \alpha = \omega\sqrt{\frac{\varepsilon\mu}{2}}\left(\sqrt{1+\frac{\sigma^2}{\omega^2\varepsilon^2}}-1\right)^{1/2} \tag{9.1.21a}$$

如果导电介质为良导体，$\sigma/\omega\varepsilon\gg1$(注意：与频率有关)，于是

$$\alpha = \beta = \sqrt{\frac{\sigma\mu\omega}{2}} \tag{9.1.21b}$$

电磁波透入到良导体的深度为 $\delta=1/\alpha=\sqrt{2/(\sigma\mu\omega)}$，如铜的 $\sigma\sim5.8\times10^7\,\mathrm{S/m}$，对频率为 1MHz 的电磁波，透入深度约为 $6\times10^{-2}\,\mathrm{mm}$；若导电介质是非良导体，即 $\sigma/(\omega\varepsilon)\ll1$(特别是高频)，那么

$$\beta = \omega\sqrt{\varepsilon\mu}; \quad \alpha = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} \tag{9.1.22}$$

这时 $\beta\gg\alpha$，所以衰减很小. 继续假定 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的方向一致，由方程(9.1.8)

$$\boldsymbol{B}_0 = \frac{1}{\omega}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_0 = \frac{1}{\omega}(\beta+\mathrm{i}\alpha)\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{E}_0 \tag{9.1.23}$$

式中 $\boldsymbol{e}$ 是 $\boldsymbol{\alpha}$ 或 $\boldsymbol{\beta}$ 方向的单位矢量，上式可以改写成

$$\boldsymbol{B}_0 = \frac{1}{\omega}(\beta+\mathrm{i}\alpha)\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{E}_0 = \frac{1}{\omega}\sqrt{\alpha^2+\beta^2}\exp(\mathrm{i}\phi)\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{E}_0 \tag{9.1.24}$$

其中 $\phi=\arctan(\alpha/\beta)$，即

$$\boldsymbol{B}_0 = \sqrt{\varepsilon\mu}\left[1+\left(\frac{\sigma}{\omega\varepsilon}\right)^2\right]^{1/4}\exp(\mathrm{i}\phi)\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{E}_0 \tag{9.1.25}$$

分两种情况讨论：

1. 对良导体 $\sigma/\omega\varepsilon\gg1$，$\alpha=\beta=\sqrt{\sigma\mu\omega/2}$，$\phi=\pi/4$，于是

$$\boldsymbol{B}_0 = \frac{(1+\mathrm{i})}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\sigma\mu}{\omega}}\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{E}_0 \tag{9.1.26}$$

因此电场与磁场之间有 $\pi/4$ 的相位差，而且磁场能量大于电场能量；

2. 对不良导体 $\sigma/\omega\varepsilon\ll1$，由方程(9.1.21)，$\phi\approx0$，于是

$$\boldsymbol{B}_0 = \sqrt{\varepsilon\mu}\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{E}_0 \tag{9.1.27}$$

因此，磁场与电场同相位，且两者大小之比为 $\sqrt{\varepsilon\mu}$.

电磁波的偏振：最后讨论电磁波的偏振问题，若平面波的电矢量 $\boldsymbol{E}$ 始终在一个方向 $\boldsymbol{e}_1$（磁矢量 $\boldsymbol{B}$ 的方向也固定且由式(9.1.8)决定），称这个电磁波为**线偏振波**. 考虑偏振矢量分别为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的两个线偏振波

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}_1 &= \boldsymbol{e}_1 E_{10} \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \varphi_1)] \\ \boldsymbol{E}_2 &= \boldsymbol{e}_2 E_{20} \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \varphi_2)] \end{aligned} \tag{9.1.28}$$

其中 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 相互垂直且 $\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{k}/k$，$\varphi_1$ 和 φ_2 分别是两个波的相位. 两个波的线性叠加为

$$\boldsymbol{E} = [\boldsymbol{e}_1 E_{10} \exp(\mathrm{i}\varphi_1) + \boldsymbol{e}_2 E_{20} \exp(\mathrm{i}\varphi_2)] \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{9.1.29}$$

分三种情况讨论：

1. 如果两个波的相位相同，$\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi$，那么

$$\boldsymbol{E} = [\boldsymbol{e}_1 E_{10} + \boldsymbol{e}_2 E_{20}] \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \varphi)] \tag{9.1.30}$$

两个矢量相加后仍然是一个固定方向矢量，于是合成电磁波还是一个线偏振波；

2. 当两个波的相位不同，取式(9.1.28)的实部，则

$$\boldsymbol{E}_1 = \boldsymbol{e}_1 E_{10} \cos(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \varphi_1); \quad \boldsymbol{E}_2 = \boldsymbol{e}_2 E_{20} \cos(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \varphi_2) \tag{9.1.31}$$

消去空间和时间变量得到

$$\left(\frac{E_1}{E_{10}}\right)^2 + \left(\frac{E_2}{E_{20}}\right)^2 - 2\left(\frac{E_1}{E_{10}}\right)\left(\frac{E_2}{E_{20}}\right)\cos(\varphi_1 - \varphi_2) = \sin^2(\varphi_1 - \varphi_2) \tag{9.1.32}$$

显然上式是一个椭圆方程，因此合成波电场矢量的端点轨迹是一个椭圆，故称为**椭圆偏振波**；

3. $E_{10} = E_{20} = E_0$，并且相位差为 $\varphi_1 - \varphi_2 = \pm\pi/2$，则椭圆退化成一个圆，称为**圆偏振波**. 由式(9.1.29)，圆偏振波可表示为

$$\boldsymbol{E} = E_0(\boldsymbol{e}_1 \pm \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2) \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)] \tag{9.1.33}$$

为了看清楚"±"的意义，取上式实部，并且分析原点($\boldsymbol{r}=0$)电场矢量振动

$$\boldsymbol{E}(0,t) = E_0(\boldsymbol{e}_1 \cos\omega t \pm \boldsymbol{e}_2 \sin\omega t) \tag{9.1.34}$$

因此"+"表示电矢量是逆时针变化的，称为**左螺旋圆偏振波**；而"−"表示电矢量是顺时针变化的，称为**右螺旋圆偏振波**.

9.2　电磁波在平面界面的反射和折射、全反射

考虑无限大空间充满两种介质，介质的分界面是平面. 分界面是一个不连续的面，介质参数有突变，因而电磁场也有突变. 必须满足边界方程(7.3.23)、(7.3.24)以及(7.3.26)和(7.3.29). 下面讨论电磁波在介质分界面上的反射和折射.

非导电介质-非导电介质界面：对非导电介质分界面，面电流密度和面电荷密度为零. 设入射到界面的电磁波为

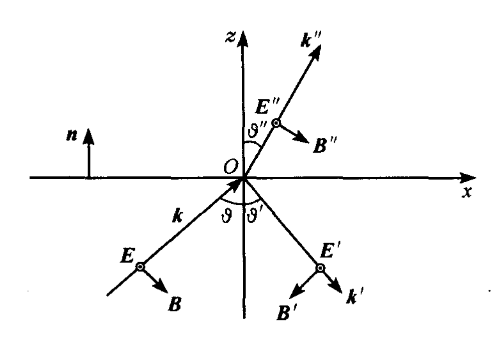


图 9.2.1 入射波、反射波和折射波
(电场矢量垂直于纸面向外)

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)\tag{9.2.1}$$

反射波和折射波分别为

$$\boldsymbol{E}'=\boldsymbol{E}'_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega t);$$
$$\boldsymbol{E}''=\boldsymbol{E}''_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)\tag{9.2.2}$$

界面的法向 $\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{k}$ 组成的平面称为入射面,假定为 xOz 平面,如图 9.2.1. 设入射角、反射角和折射角分别为 ϑ、ϑ' 和 ϑ'',在分界面 $z=0$,把以上三式代入边界方程(7.3.26)

$$E_{0t}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0)+E'_{0t}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_0)=E''_{0t}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{r}_0)\tag{9.2.3}$$

其中 $\boldsymbol{r}_0=(x,y)$ 为分界面上的点. 上式对任意的 $\boldsymbol{r}_0$ 成立,故要求相位匹配

$$k_x x+k_y y=k'_x x+k'_y y=k''_x x+k''_y y\tag{9.2.4}$$

由 x 和 y 的任意性得到:$k_x=k'_x=k''_x$ 和 $k_y=k'_y=k''_y$,而我们已假定入射波在 xOz 平面内,故 $k_y=k'_y=k''_y=0$,因此入射波、反射波和折射波是共面的. 由 $k_x=k'_x=k''_x$ 得

$$k\sin\vartheta=k'\sin\vartheta'=k''\sin\vartheta''\tag{9.2.5}$$

式中 $k=\omega/v_1$、$k'=\omega/v_1$ 和 $k''=\omega/v_2$,v_1 和 v_2 分别为两种介质的电磁波速度. 因此

$$\sin\vartheta=\sin\vartheta';\quad \frac{\sin\vartheta}{\sin\vartheta''}=\frac{\sqrt{\varepsilon_2\mu_2}}{\sqrt{\varepsilon_1\mu_1}}=\frac{n_2}{n_1}\tag{9.2.6}$$

式中 n_2 和 n_1 为介质的折射率,上式表明:入射角等于反射角,入射角和折射角满足方程(9.2.6)的第二式,称为 **Snell 定律**.

入射波可以有两个独立的偏振方向,对不同的偏振方向,其反射和折射强度不同,故分别讨论.

1. 入射电场矢量 $\boldsymbol{E}$ 垂直于入射面(垂直于纸面向纸外,图 9.2.1):显然这时的反射波和折射波的电场矢量都垂直于入射面,而磁感应强度矢量 $\boldsymbol{B}$ 平行于入射面,$\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 的关系由 $\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_0=\omega\boldsymbol{B}_0$ 决定.

由方程(9.2.3),$E_{0t}+E'_{0t}=E''_{0t}$,注意到入射电场矢量 $\boldsymbol{E}$ 垂直于入射面,只有切向分量,于是

$$E_0+E'_0=E''_0\tag{9.2.7}$$

另一方面,由方程(7.3.29)

$$\frac{1}{\mu_1}(B_{0t}+B'_{0t})=\frac{1}{\mu_2}B''_{0t}\tag{9.2.8}$$

除铁磁物质外,一般 $\mu_1=\mu_2=\mu_0$,因此

$$B_0 = \sqrt{\varepsilon\mu}E_0 = \sqrt{\varepsilon\mu_0}E_0 \tag{9.2.9}$$

注意到关系 $B_{0t}=B_0\cos\vartheta$；$B'_{0t}=-B'_0\cos\vartheta'$；$B''_{0t}=B''_0\cos\vartheta''$，方程(9.2.8)变成

$$\sqrt{\varepsilon_1}E_0\cos\vartheta - \sqrt{\varepsilon_1}E'_0\cos\vartheta' = \sqrt{\varepsilon_2}E''_0\cos\vartheta'' \tag{9.2.10}$$

解方程(9.2.10)和方程(9.2.7)，可以得到反射波和折射波与入射波的强度比为

$$\begin{aligned}\left(\frac{E'_0}{E_0}\right)_\perp &= \frac{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta - \sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta''}{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta + \sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta''} = \frac{\sin(\vartheta''-\vartheta)}{\sin(\vartheta''+\vartheta)} \\ \left(\frac{E''_0}{E_0}\right)_\perp &= \frac{2\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta}{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta + \sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta''} = \frac{2\cos\vartheta\sin\vartheta''}{\sin(\vartheta''+\vartheta)}\end{aligned} \tag{9.2.11}$$

上式第二个等式利用了折射定律：$\sqrt{\varepsilon_2}\sin\vartheta''=\sqrt{\varepsilon_1}\sin\vartheta$.

2. 入射电场矢量 $\boldsymbol{E}$ 平行于入射面：这时磁场 $\boldsymbol{B}$ 的方向垂直于入射平面，于是

$$-E_0\cos\vartheta + E'_0\cos\vartheta' = E''_0\cos\vartheta'' \tag{9.2.12}$$

$$\sqrt{\varepsilon_1}E_0 + \sqrt{\varepsilon_1}E'_0 = \sqrt{\varepsilon_2}E''_0 \tag{9.2.13}$$

联立方程(9.2.12)和(9.2.13)，求得

$$\begin{aligned}\left(\frac{E'_0}{E_0}\right)_\parallel &= \frac{\sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta - \sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta''}{\sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta + \sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta''} = \frac{\tan(\vartheta-\vartheta'')}{\tan(\vartheta+\vartheta'')} \\ \left(\frac{E''_0}{E_0}\right)_\parallel &= \frac{2\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta}{\sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta + \sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta''} = \frac{2\cos\vartheta\sin\vartheta''}{\cos(\vartheta-\vartheta'')\sin(\vartheta''+\vartheta)}\end{aligned} \tag{9.2.14}$$

利用式(9.1.10)，入射波的平均能流为

$$\langle \boldsymbol{S}_e \rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^* \times \boldsymbol{H}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{E}_0 \times \left(\frac{1}{\mu_1\omega}\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{E}_0\right) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\,|\boldsymbol{E}_0|^2\boldsymbol{e}_k \tag{9.2.15}$$

式中 $\boldsymbol{e}_k$ 为入射波方向 $\boldsymbol{k}$ 的单位矢量，同样，反射波和折射波的平均能流分别为

$$\langle \boldsymbol{S}'_e \rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}'^* \times \boldsymbol{H}') = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}}\,|\boldsymbol{E}'_0|^2\boldsymbol{e}_{k'} \tag{9.2.16}$$

$$\langle \boldsymbol{S}''_e \rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}''^* \times \boldsymbol{H}'') = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\,|\boldsymbol{E}''_0|^2\boldsymbol{e}_{k''} \tag{9.2.17}$$

上二式中 $\boldsymbol{e}_{k'}$ 和 $\boldsymbol{e}_{k''}$ 分别为反射波方向 $\boldsymbol{k}'$ 和折射波方向 $\boldsymbol{k}''$ 的单位矢量. 定义反射系数和折射系数分别为

$$R = \left|\frac{\langle \boldsymbol{S}'_e \rangle \cdot \boldsymbol{n}}{\langle \boldsymbol{S}_e \rangle \cdot \boldsymbol{n}}\right| = \left|\frac{E'_0\cos\vartheta'}{E_0\cos\vartheta}\right|^2 = \left|\frac{E'_0}{E_0}\right|^2 \tag{9.2.18}$$

$$T = \left|\frac{\langle \boldsymbol{S}''_e \rangle \cdot \boldsymbol{n}}{\langle \boldsymbol{S}_e \rangle \cdot \boldsymbol{n}}\right| = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}\left|\frac{E''_0}{E_0}\right|^2\frac{(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e}_{k''})}{(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{e}_k)} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}\left|\frac{E''_0}{E_0}\right|^2\frac{\cos\vartheta''}{\cos\vartheta} \tag{9.2.19}$$

把式(9.2.11)和(9.2.14)代入(9.2.18)和(9.2.19)式可求得电场矢量 $\boldsymbol{E}$ 平行或者垂直于入射面时的反射系数和折射系数.

介绍几个重要的特性.

Brewster 角:由式(9.2.14):当 $\vartheta+\vartheta''=\pi/2$ 时,$\tan(\vartheta+\vartheta')=\infty$,$(E_0'/E_0)_{\parallel}=0$,即反射波为零! 这时 Snell 定律为

$$\sqrt{\varepsilon_1}\sin\vartheta=\sqrt{\varepsilon_2}\sin\left(\frac{\pi}{2}-\vartheta\right)=\sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta \tag{9.2.20}$$

即入射角为 $\vartheta_B=\arctan\sqrt{\varepsilon_2/\varepsilon_1}$,称为 **Brewster 角**. 当入射为 ϑ_B,平行于入射面偏振的反射波振幅为零. 因此,如果入射波中既有平行于入射面偏振的波又有垂直于入射面偏振的波,那么只要调整入射角为 Brewster 角,则反射波中就只包含垂直于入射面偏振的波,用这一特性可以得到纯的偏振光.

半波损失:当垂直入射时,由方程(9.2.11),反射波与入射波的振幅比可能为负值. 事实上,当$\sqrt{\varepsilon_2}>\sqrt{\varepsilon_1}$,即 $\vartheta>\vartheta''$时,电磁波从光疏媒质传播到光密媒质,反射波与入射波的振幅比为负值. 说明电场矢量经界面反射后相位改变了 π,称为**半波损失**. 只有垂直于入射面偏振的波,其反射波有半波损失,透射波没有半波损失. 对平行于入射面偏振的波情况,其反射波也没有半波损失.

全反射:当 $\vartheta''=\pi/2$ 时,电磁波不折射到第二种介质,称为**全反射**. 由 Snell 定律,发生全反射的入射角为 $\vartheta\geqslant\vartheta_c$,$\vartheta_c=\arcsin(\sqrt{\varepsilon_2/\varepsilon_1})$称为**临界角**,显然要求 $\varepsilon_2<\varepsilon_1$. 当发生全反射时

$$\cos\vartheta''=\sqrt{1-\sin^2\vartheta''}=\sqrt{1-\frac{\sin^2\vartheta}{\sin^2\vartheta_c}}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{\sin^2\vartheta}{\sin^2\vartheta_c}-1}\equiv\mathrm{i}\beta \tag{9.2.21}$$

为虚数,反射波与入射波的振幅比为

$$\left(\frac{E_0'}{E_0}\right)_{\perp}=\frac{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta-\mathrm{i}\beta\sqrt{\varepsilon_2}}{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\vartheta+\mathrm{i}\beta\sqrt{\varepsilon_2}};\quad\left(\frac{E_0'}{E_0}\right)_{\parallel}=\frac{\sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta-\mathrm{i}\beta\sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon_2}\cos\vartheta+\mathrm{i}\beta\sqrt{\varepsilon_1}} \tag{9.2.22}$$

它们的模为

$$\left|\frac{E_0'}{E_0}\right|_{\perp}=\left|\frac{E_0'}{E_0}\right|_{\parallel}=1 \tag{9.2.23}$$

尽管反射波与入射波振幅比的模为 1,但不意味着电磁波一点也不能透过界面进入第二种介质中了. 因电磁波在 xOz 平面传播,$k_y''=0$,故

$$k_z''=\sqrt{k''^2-k_x''^2}=k''\sqrt{1-\sin^2\vartheta''}=\mathrm{i}k''\beta \tag{9.2.24}$$

因此透射波为

$$\boldsymbol{E}''=\boldsymbol{E}_0''\exp[\mathrm{i}(k_z''z+k_x''x-\omega t)]=\boldsymbol{E}_0''\mathrm{e}^{-\beta k''z}\cdot\exp[\mathrm{i}(k_x''x-\omega t)] \tag{9.2.25}$$

上式表示,波在 x 方向传播,而在 z 方向衰减,假定入射波是垂直于入射面偏振的波,那么

$$\boldsymbol{E}''=\boldsymbol{e}_yE_0''\mathrm{e}^{-\beta k''z}\cdot\exp[\mathrm{i}(k_x''x-\omega t)] \tag{9.2.26}$$

$$\boldsymbol{B}'' = \frac{1}{\omega}\boldsymbol{k}'' \times \boldsymbol{E}'' = \frac{1}{\omega}(k''_x \boldsymbol{e}_x + k''_z \boldsymbol{e}_z) \times \boldsymbol{E}'' \tag{9.2.27}$$

故 $\boldsymbol{B}''$ 的 $\boldsymbol{e}_z$ 和 $\boldsymbol{e}_x$ 分量分别为

$$B''_z = \frac{1}{\omega}k''_x E''_0 \mathrm{e}^{-\beta k'' z} \cdot \exp[\mathrm{i}(k''_x x - \omega t)]$$

$$B''_x = -\frac{1}{\omega}k''_z E''_0 \mathrm{e}^{-\beta k'' z} \cdot \exp[\mathrm{i}(k''_x x - \omega t)]$$

$$= -\frac{1}{\omega}k'' \sqrt{1 - \sin^2\vartheta''} E''_0 \mathrm{e}^{-\beta k'' z} \exp[\mathrm{i}(k''_x x - \omega t)]$$

$$= -\frac{1}{\omega}\mathrm{i}\beta k'' E''_0 \mathrm{e}^{-\beta k'' z} \cdot \exp[\mathrm{i}(k''_x x - \omega t)] \tag{9.2.28}$$

透射波能流

$$\boldsymbol{S}''_{\mathrm{t}} = \frac{1}{\mu_2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}'') \times (\mathrm{Re}\boldsymbol{B}'') \tag{9.2.29}$$

的 $\boldsymbol{e}_x$ 和 $\boldsymbol{e}_z$ 分量分别为

$$(\boldsymbol{S}''_{\mathrm{t}})_x = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_2}}\sin\vartheta \mid E''_0 \mid^2 \mathrm{e}^{-2\beta k'' z} \cdot \cos^2(k''_x x - \omega t) \tag{9.2.30}$$

$$(\boldsymbol{S}''_{\mathrm{t}})_z = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}}\beta \mid E''_0 \mid^2 \mathrm{e}^{-2\beta k'' z} \cdot \sin 2(k''_x x - \omega t) \tag{9.2.31}$$

可见 $\boldsymbol{e}_z$ 方向的平均能流 $\langle(\boldsymbol{S}''_{\mathrm{t}})_z\rangle = 0$，而 $\boldsymbol{e}_x$ 方向的平均能流

$$\langle \boldsymbol{S}''_{\mathrm{t}x} \rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_2}}\sin\vartheta \mid E''_0 \mid^2 \mathrm{e}^{-2\beta k'' z} \tag{9.2.32}$$

不为零，但限制在界面附近.

非导电介质-金属界面：如果介质 2 是金属，只要引入复介电常量

$$\varepsilon'(\omega) = \varepsilon + \mathrm{i}\sigma/\omega$$

方程(9.2.6)，(9.2.11)和(9.2.14)依然成立. 但金属中电磁波的传播是衰减的，问题较复杂，我们仅考虑垂直入射情况，即 $\vartheta = 0$. 由方程(9.2.11)和(9.2.14)

$$\left(\frac{E'_0}{E_0}\right)_{\perp} = -\left(\frac{E'_0}{E_0}\right)_{\parallel} = \frac{\sqrt{\varepsilon_1} - \sqrt{\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon_1} + \sqrt{\varepsilon'}} \tag{9.2.33}$$

假定介质 1 为真空，介质 2 为良导体，反射系数为

$$R = \left|\frac{E'_0}{E_0}\right|^2_{\perp} = \left|\frac{E'_0}{E_0}\right|^2_{\parallel} = \left|\frac{1 - \sqrt{\frac{\sigma}{2\varepsilon_0\omega}}(1 + \mathrm{i})}{1 + \sqrt{\frac{\sigma}{2\varepsilon_0\omega}}(1 + \mathrm{i})}\right|^2 \approx 1 - \sqrt{\frac{8\varepsilon_0\omega}{\sigma}} \tag{9.2.34}$$

上式表明，良导体的反射系数接近 1，电磁波能量基本被反射，只有少部分透入导体内. 对理想导体，$\sigma \to \infty$，$R = 1$，可以认为导体中不存在电磁波. 因此导体的边界条件简化为

$$\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{n}=0;\quad \boldsymbol{H}\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}_{\mathrm{f}} \tag{9.2.35}$$

或者

$$\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_{\mathrm{f}};\quad \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{n}=0 \tag{9.2.36}$$

9.3 各向异性介质中的电磁波和双折射现象

在前面的讨论中，我们假定介质的本构方程为 $\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H}$，这里介电常量 ε 和磁导率 μ 为标量. 事实上，许多各向异性的介质，特别是晶体材料，介电常量和磁导率不是简单的标量，而是一个二阶张量. 考虑磁各向同性但电各向异性的均匀电介质晶体，其本构关系为

$$\boldsymbol{D}=\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{T}};\quad \boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H} \tag{9.3.1}$$

其中磁导率 μ 仍为标量，而介电常量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是二阶张量，如果用 3×3 矩阵表示，它的元素为 $\varepsilon_{ik}(i,k=1,2,3)$. 由能量守恒定律可以证明介电常量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是对称张量. 为了简单起见，设电介质晶体的电导率为零，因此电介质晶体中电流密度 $\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}=0$. 由式(7.4.10)

$$-\nabla\cdot\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}=\frac{\partial w}{\partial t} \tag{9.3.2}$$

其中 $\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}$ 和 w 分别为介质中能量密度和能量流密度矢量，由式(7.4.33)和(7.4.34)决定，故上式右边为

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}(E_k\varepsilon_{kl}E_l+\mu H^2) \tag{9.3.3}$$

利用矢量运算公式 $\nabla\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})=\boldsymbol{H}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{E})-\boldsymbol{E}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{H})$ 和 Maxwell 方程(7.3.17)和(7.3.18)，方程(9.3.2)左边为

$$\begin{aligned}
-\nabla\cdot\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}&=-\nabla\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})=\boldsymbol{E}\cdot\dot{\boldsymbol{D}}+\boldsymbol{H}\cdot\dot{\boldsymbol{B}}\\
&=\left[E_k\varepsilon_{kl}\dot{E}_l+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}(\mu H^2)\right]\\
&=\left[\frac{1}{2}(E_k\varepsilon_{kl}\dot{E}_l+\dot{E}_k\varepsilon_{kl}E_l)+\frac{1}{2}(E_k\varepsilon_{kl}\dot{E}_l-\dot{E}_k\varepsilon_{kl}E_l)\right]+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}(\mu H^2)\\
&=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}(E_k\varepsilon_{kl}E_l+\mu H^2)+\frac{1}{2}(E_k\varepsilon_{kl}\dot{E}_l-\dot{E}_k\varepsilon_{kl}E_l)\\
&=\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{1}{2}(E_k\varepsilon_{kl}\dot{E}_l-\dot{E}_k\varepsilon_{kl}E_l)
\end{aligned} \tag{9.3.4}$$

因此由方程(9.3.2)得到

$$(E_k\varepsilon_{kl}\dot{E}_l-\dot{E}_k\varepsilon_{kl}E_l)=0 \tag{9.3.5}$$

上式求和交换指标得到

$$(E_l\varepsilon_{lk}\dot{E}_k-\dot{E}_k\varepsilon_{kl}E_l)=E_l\dot{E}_k(\varepsilon_{lk}-\varepsilon_{kl})=0$$

于是 $\varepsilon_{lk}=\varepsilon_{kl}$，即 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是对称张量，有6个独立的分量. 因为 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}$ 是标量

$$\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}=\varepsilon_{11}E_1^2+\varepsilon_{22}E_2^2+\varepsilon_{33}E_3^2+2\varepsilon_{12}E_1E_2+2\varepsilon_{13}E_1E_3+2\varepsilon_{23}E_2E_3 \tag{9.3.6}$$

在坐标变换下不变，通过坐标旋转，可以使以上二次式的交叉项为零，即

$$\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}=\varepsilon_{11}E_1^2+\varepsilon_{22}E_2^2+\varepsilon_{33}E_3^2 \tag{9.3.7}$$

此时电位移矢量的分量形式为

$$D_1=\varepsilon_{11}E_1;\quad D_2=\varepsilon_{22}E_2;\quad D_3=\varepsilon_{33}E_3 \tag{9.3.8}$$

使(9.3.8)式成立的坐标轴方向称为**晶体的主轴**. 若 $\varepsilon_{11}=\varepsilon_{22}=\varepsilon_{33}=\varepsilon$，则电介质为各向同性；若 $\varepsilon_1\equiv\varepsilon_{11}=\varepsilon_{22}\neq\varepsilon_{33}\equiv\varepsilon_3$，称为**单轴晶体**；若 $\varepsilon_{11}\neq\varepsilon_{22}\neq\varepsilon_{33}$，称为**双轴晶体**. 我们只考虑单轴晶体中电磁波的传播. 由方程(9.1.1)和(9.1.2)

$$\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{E}+\mu\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{T}})=0 \tag{9.3.9}$$

注意：此时不能使用方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{D}=\varepsilon\nabla\cdot\boldsymbol{E}=0$ 把上式左边化简了. 设电场有形式

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)] \tag{9.3.10}$$

代入方程(9.3.9)得到

$$\boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_0)+\omega^2\mu\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{E}_0^{\mathrm{T}}=0 \tag{9.3.11}$$

上式写成矩阵的形式

$$\boldsymbol{\Lambda}(E_{01},E_{02},E_{03})^{\mathrm{T}}=0 \tag{9.3.12}$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda}$ 为矩阵

$$\boldsymbol{\Lambda}=\begin{bmatrix} k^2-\omega^2\mu\varepsilon_1 & 0 & -(1-\varepsilon_3/\varepsilon_1)k_1k_3 \\ 0 & k^2-\omega^2\mu\varepsilon_1 & -(1-\varepsilon_3/\varepsilon_1)k_2k_3 \\ 0 & 0 & k_1^2+k_2^2+(\varepsilon_3/\varepsilon_1)k_3^2-\omega^2\mu\varepsilon_3 \end{bmatrix} \tag{9.3.13}$$

方程(9.3.12)存在非零解的条件为

$$\det(\boldsymbol{\Lambda})=0 \tag{9.3.14}$$

上式给出 k 与 ω 的关系，即色散方程. 显然此方程可分解成两个独立的方程

$$\begin{aligned} k^2-\omega^2\mu\varepsilon_1&=0 \\ k_1^2+k_2^2+(\varepsilon_3/\varepsilon_1)k_3^2-\omega^2\mu\varepsilon_3&=0 \end{aligned} \tag{9.3.15}$$

这两个解表明单轴晶体中可以传播两类平面波

1. 寻常波(即o光)

色散关系为 $k=\omega\sqrt{\mu\varepsilon_1}$，代入方程(9.3.12)可得：$E_3=0$. 于是 $\boldsymbol{D}=\varepsilon_1\boldsymbol{E}$，由Maxwell方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{D}=\varepsilon_1\nabla\cdot\boldsymbol{E}=0$ 得到 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{E}=0$. 即波矢量与电场垂直且 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{D}$ 平行，与各向同性介质中的电磁波一样；

2. 非寻常波(即e光)

色散关系比较复杂，假定电磁波在 yOz 平面中传播，即 $k_1=0$，取 $\boldsymbol{k}$ 与 z 轴的夹角为 ϑ，则

$$k = \omega\sqrt{\frac{\varepsilon_1\varepsilon_3\mu}{\varepsilon_1 \sin^2\vartheta + \varepsilon_3 \cos^2\vartheta}} \tag{9.3.16}$$

代入方程(9.3.12)可得：$E_1=0$(注意条件：仅当 $k_1=0$ 时)，即电场矢量 $\boldsymbol{E}$ 处于 yOz 平面，$D_2=\varepsilon_{22}E_2$；$D_3=\varepsilon_{33}E_3$，故 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{D}$ 不平行. 与各向同性介质中的电磁波不一样，相速度为

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{\sin^2\vartheta}{\varepsilon_3\mu} + \frac{\cos^2\vartheta}{\varepsilon_1\mu}} \tag{9.3.17}$$

因此一束光通过单轴晶体后变成两束，一束为寻常光，另一束为非寻常光，此即为**双折射现象**.

我们来分析各向异性介质中电磁波传播的一般规律. 在各向异性的介质中，$\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{D}$ 的方向一般不一致. 对于无源场 $\nabla\cdot\boldsymbol{D}=0$，$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$，即：$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{D}=0$ 和 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{B}=0$. 因此平面电磁波波矢量 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 垂直. 由 Maxwell 方程(9.1.1)和(9.1.2)的第二式

$$\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E} = \mu\omega\boldsymbol{H};\quad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{H} = -\omega\boldsymbol{D} \tag{9.3.18}$$

可见 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{D}$ 二矢量与 $\boldsymbol{H}$ 垂直，因此 $\boldsymbol{D}$、$\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{k}$ 三个是共面矢量. 由上式

$$\boldsymbol{D} = -\frac{1}{\omega}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{H} = -\frac{1}{\mu\omega^2}\boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}) = \frac{k^2}{\mu\omega^2}[\boldsymbol{E}-(\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{E})\boldsymbol{e}_k] \tag{9.3.19}$$

式中 $\boldsymbol{e}_k$ 是波矢量 $\boldsymbol{k}$ 方向的单位矢量，可见 $\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 的方向一般是不一致的. 另一方面，由式(9.3.18)，能量密度为

$$w = \frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{H}) = \frac{k}{\omega}[\boldsymbol{e}_k\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})] = \frac{k}{\omega}\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{S}_e \tag{9.3.20}$$

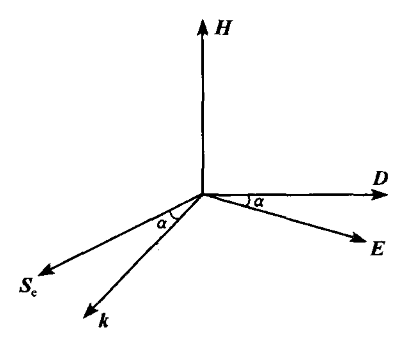


图 9.3.1　五个矢量方向的关系

因此群速度为

$$v_g = \frac{|\boldsymbol{S}_e|}{w} = \frac{k}{\omega\cos\alpha} = \frac{v_p}{\cos\alpha} \tag{9.3.21}$$

其中 α 为能量流矢量与波矢量 $\boldsymbol{k}$ 的夹角，也是 $\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 之间的夹角，或者 $v_p=v_g\cos\alpha$，即光波等位面传播方向(波矢量 $\boldsymbol{k}$ 方向)与光波能量传播方向(光线方向)不一致. 图 9.3.1 表明了 $\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{S}_e$、$\boldsymbol{D}$、$\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 五个矢量的方向关系.

9.4　电磁波在等离子体中的传播和 Faraday 旋转效应

等离子体是由离子和电子组成的电离气体，宏观上呈现电中性. 当电磁波在等离子体中传播时，其中的电子和离子都受到电磁场的作用而运动. 由于离子的质量远大于电子质量，故可以忽略离子的运动. 另一方面，平面单色电磁波的磁场分量

与电场分量对电子的作用力之比为

$$\frac{|\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{B}|}{|e\boldsymbol{E}|}\sim\frac{ev}{e}\frac{B}{E}\sim\frac{v}{c}\ll 1$$

可以忽略电磁波中磁场对电子运动的影响，电子的运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=e\boldsymbol{E} \tag{9.4.1}$$

考虑时间简谐振荡 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r})\exp(-\mathrm{i}\omega t)$，代入上式得到电子的运动速度为

$$\boldsymbol{v}=-\frac{e}{\mathrm{i}m\omega}\boldsymbol{E} \tag{9.4.2}$$

于是电流密度为

$$\boldsymbol{j}=ne\boldsymbol{v}=-\frac{ne^2}{\mathrm{i}m\omega}\boldsymbol{E}\equiv\sigma_{\mathrm{p}}\boldsymbol{E} \tag{9.4.3}$$

其中 n 是电子的密度，$\sigma_{\mathrm{p}}=-ne^2/(\mathrm{i}m\omega)$ 为相应的电导率. 另一方面，由 Maxwell 方程组

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\frac{\rho}{\varepsilon_0};\quad \nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{9.4.4}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\left(\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right) \tag{9.4.5}$$

并且注意等离子体的电中性条件：$\rho=\rho_{+}+\rho_{-}=0$，得到电场满足的方程

$$\nabla^2\boldsymbol{E}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2}-\mu_0\frac{\partial\boldsymbol{j}}{\partial t}=0 \tag{9.4.6}$$

把平面单色波 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]$ 和方程(9.4.3)代入上式得到等离子体介质中的波数-频率关系

$$k^2=\frac{1}{c^2}(\omega^2-\omega_{\mathrm{p}}^2) \tag{9.4.7}$$

其中 ω_{p} 由等离子体中电子密度、电子电量和质量决定

$$\omega_{\mathrm{p}}=\sqrt{\frac{ne^2}{m\varepsilon_0}} \tag{9.4.8}$$

称为**等离子体振荡频率**，是表征等离子体的一个特征参数. 由式(9.4.7)可见，电磁波的传播特性与频率密切相关：①当 $\omega<\omega_{\mathrm{p}}$ 时，k 为虚数，表示电磁波将迅速衰减而不能穿过等离子体；②当 $\omega>\omega_{\mathrm{p}}$ 时，k 为实数，表示电磁波可以在等离子体中传播. 等离子体的这一特性在通讯中有十分重要的应用. 地球上空的电离层(50～500km)的等离子体密度为 $10^{12}\sim10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$，最大截止频率为 10MHz. 利用其反射特性可实现短波($\omega<\omega_{\mathrm{p}}$)通讯；而电视信号频段 $\omega>\omega_{\mathrm{p}}$，故可以穿过电离层并通过卫星进行转播.

若考虑地球附近的等离子体层，必须考虑地磁场的影响. 在有外磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 存在

时，电子的运动方程应该为（注意：电磁波的磁分量作用仍然可忽略）

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=e(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}_0) \tag{9.4.9}$$

取 $\boldsymbol{B}_0=B_0\boldsymbol{e}_z$，考虑到时间因子 $\exp(-\mathrm{i}\omega t)$，(9.4.9)式的解为

$$v_x=\frac{e}{m}\frac{-\mathrm{i}\omega E_x+\omega_\mathrm{B}E_y}{\omega_\mathrm{B}^2-\omega^2};\quad v_y=\frac{e}{m}\frac{-\mathrm{i}\omega E_y-\omega_\mathrm{B}E_x}{\omega_\mathrm{B}^2-\omega^2};\quad v_z=\frac{\mathrm{i}e}{m}\frac{E_z}{\omega} \tag{9.4.10}$$

其中 $\omega_\mathrm{B}=eB_0/m$. 于是电流密度为

$$\boldsymbol{j}=ne\boldsymbol{v}=ne(v_x\boldsymbol{e}_x+v_y\boldsymbol{e}_y+v_z\boldsymbol{e}_z) \tag{9.4.11}$$

显然此时的电导率应该用张量来表示

$$j_k=\sum_{l=1}^{3}\sigma_{kl}E_l\quad(k=1,2,3) \tag{9.4.12}$$

由式(9.4.10)得到各向异性的电导率张量为

$$\boldsymbol{\sigma}=\frac{\varepsilon_0\omega_\mathrm{p}^2}{\left(1-\dfrac{\omega_\mathrm{B}^2}{\omega^2}\right)}\begin{bmatrix}-\dfrac{1}{\mathrm{i}\omega} & -\dfrac{\omega_\mathrm{B}}{\omega^2} & 0\\ \dfrac{\omega_\mathrm{B}}{\omega^2} & -\dfrac{1}{\mathrm{i}\omega} & 0\\ 0 & 0 & -\dfrac{1}{\mathrm{i}\omega}\left(1-\dfrac{\omega_\mathrm{B}^2}{\omega^2}\right)\end{bmatrix} \tag{9.4.13}$$

故存在外磁场的情况下，对简谐波，等离子体中的 Maxwell 方程组为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=0;\quad\nabla\times\boldsymbol{E}=\mathrm{i}\omega\mu_0\boldsymbol{H} \tag{9.4.14}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad\nabla\times\boldsymbol{H}=\sum_{k,l=1}^{3}\sigma_{kl}E_l\boldsymbol{e}_k-\mathrm{i}\varepsilon_0\omega\boldsymbol{E} \tag{9.4.15}$$

上式第二个方程改写成

$$\nabla\times\boldsymbol{H}=-\mathrm{i}\omega\sum_{k,l=1}^{3}\varepsilon_{kl}E_l\boldsymbol{e}_k\quad(k=1,2,3) \tag{9.4.16}$$

其中定义等效介电常量张量为 $\varepsilon_{kl}=\varepsilon_0\delta_{kl}+\mathrm{i}\sigma_{kl}/\omega$. 于是容易得到电场的波动方程为

$$\nabla^2E_k+\omega^2\mu_0\sum_{l=1}^{3}\varepsilon_{kl}E_l=0 \tag{9.4.17}$$

由此可以得到各向异性的等离子体中平面电磁波的两个性质：

（1）不存在线偏振横电磁波

设电磁波沿 z 方向传播，波的偏振方向为 $\boldsymbol{e}_x$，即只有 E_x 分量，由方程(9.4.17)得到

$$\nabla^2E_x+\omega^2\mu_0\varepsilon_{11}E_x=0;\quad\nabla^2E_y+\omega^2\mu_0\varepsilon_{21}E_x=0 \tag{9.4.18}$$

由第二式：因假定 $E_y=0$，而 $\varepsilon_{21}\neq0$，故只有 $E_x\equiv0$，即这样的线偏振横电磁波是不存在的.

(2) 设电磁波为沿 z 方向传播(即外磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 方向)、右旋圆偏振平面波

$$\boldsymbol{E} = E_0(\boldsymbol{e}_x - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_y)\exp[\mathrm{i}(kz - \omega t)] \tag{9.4.19}$$

代入方程(9.4.17)得

$$k^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\left(1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2/\omega^2}{1 + \omega_\mathrm{B}/\omega}\right) \tag{9.4.20}$$

如果电磁波为左旋圆偏振平面波

$$\boldsymbol{E} = E_0(\boldsymbol{e}_x + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_y)\exp[\mathrm{i}(kz - \omega t)] \tag{9.4.21}$$

代入方程(9.4.17)得

$$k^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\left(1 - \frac{\omega_\mathrm{p}^2/\omega^2}{1 - \omega_\mathrm{B}/\omega}\right) \tag{9.4.22}$$

可见存在外磁场时,右旋与左旋圆偏振波具有不同的波速. 如果一个线偏振波由各向同性的空间进入各向异性的等离子体中,由于线偏振波可以分解为两个等幅的右旋与左旋圆偏振波(见习题 9.10),而右旋与左旋圆波的波速又不相等,结果是电磁波的偏振面在等离子体中以前进方向为轴不断地旋转,称为 **Faraday 旋转效应**(如图 9.4.1). Faraday 旋转在解释宇宙中微波辐射的偏振时有重要的应用.

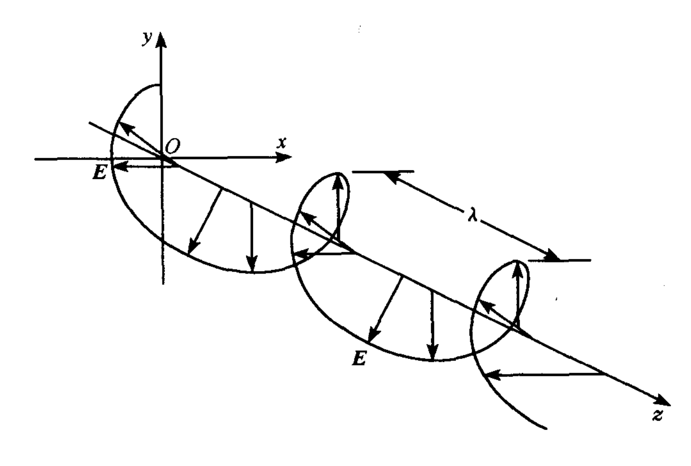


图 9.4.1　Faraday 旋转效应

9.5　波导中波的传播:相速度、群速度和截止频率

由式(9.2.34),电磁波不能在理想导体中传播,因此可以用理想导体(金属)构成截面为各种形状的中空柱体,那么电磁波就只能沿着柱方向传播. 这样的结构称为**波导**. 我们首先考虑横截面为矩形的波导,分析电磁波在矩形波导中传播的特征.

矩形波导:设矩形波导长度方向沿 z 轴方向,四边位于 $x=0$ 和 $x=a$;$y=0$ 和 $y=b$,a、b 分别是矩形的宽度和高度. 考虑 z 方向的行波,令

$$\bar{\boldsymbol{E}}(x,y,z,t)=\boldsymbol{E}(x,y)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)]$$
$$\bar{\boldsymbol{H}}(x,y,z,t)=\boldsymbol{H}(x,y)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)] \tag{9.5.1}$$

代入波动方程(9.1.4)和(9.1.5),得到与坐标 x 和 y 有关的部分满足的方程

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+(k^2-k_z^2)\right]\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}(x,y)\\ \boldsymbol{H}(x,y)\end{bmatrix}=0 \tag{9.5.2}$$

式中 $k=\omega/c$ 为波数. 另一方面,利用真空中的 Maxwell 方程$\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{E}}=0$ 和$\nabla\cdot\bar{\boldsymbol{B}}=0$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x}+\frac{\partial E_y}{\partial y}+\mathrm{i}k_z E_z=0;\quad \frac{\partial H_x}{\partial x}+\frac{\partial H_y}{\partial y}+\mathrm{i}k_z H_z=0 \tag{9.5.3}$$

由$\nabla\times\bar{\boldsymbol{E}}=\mathrm{i}\omega\mu_0\bar{\boldsymbol{H}}$ 和$\nabla\times\bar{\boldsymbol{H}}=-\mathrm{i}\omega\varepsilon_0\bar{\boldsymbol{H}}$ 得到

$$\frac{\partial E_z}{\partial y}-\mathrm{i}k_z E_y=\mathrm{i}\omega\mu_0 H_x;\quad \frac{\partial H_z}{\partial y}-\mathrm{i}k_z H_y=-\mathrm{i}\omega\varepsilon_0 E_x \tag{9.5.4a}$$

$$\mathrm{i}k_z E_x-\frac{\partial E_z}{\partial x}=\mathrm{i}\omega\mu_0 H_y;\quad \mathrm{i}k_z H_x-\frac{\partial H_z}{\partial x}=-\mathrm{i}\omega\varepsilon_0 E_y \tag{9.5.4b}$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x}-\frac{\partial E_x}{\partial y}=\mathrm{i}\omega\mu_0 H_z;\quad \frac{\partial H_y}{\partial x}-\frac{\partial H_x}{\partial y}=-\mathrm{i}\omega\varepsilon_0 E_z \tag{9.5.4c}$$

于是由上式和式(9.5.3)可以得到用电磁场矢量的 z 方向分量 E_z 和 H_z 表示的 4 个横向分量 E_x、E_y、H_x 和 H_y

$$E_x=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(k_z\frac{\partial E_z}{\partial x}+\omega\mu_0\frac{\partial H_z}{\partial y}\right);\quad E_y=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(k_z\frac{\partial E_z}{\partial y}-\omega\mu_0\frac{\partial H_z}{\partial x}\right)$$
$$H_x=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(-\omega\varepsilon_0\frac{\partial E_z}{\partial y}+k_z\frac{\partial H_z}{\partial x}\right);\quad H_y=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(\omega\varepsilon_0\frac{\partial E_z}{\partial x}+k_z\frac{\partial H_z}{\partial y}\right) \tag{9.5.5}$$

式中 $k_c^2=k^2-k_z^2$. 可见只要求出电磁波的纵向分量 E_z 和 H_z,就可用以上各式求出 4 个横向分量 E_x、E_y、H_x 和 H_y. 我们知道,无限空间传播的电磁波是横波,即电场矢量和磁场矢量与传播方向垂直,称为**横电磁波**,或称为 TEM 波. 但在波导中,如果令 $E_z=H_z=0$,那么电场矢量和磁场矢量的分量全为零. 因此至多只能有一个为零. 对 $E_z=0$ 而 $H_z\neq0$ 的情况,称为**横电波**,或 TE 波;对 $E_z\neq0$ 而 $H_z=0$ 的情况,称为**横磁波**,或 TM 波.

(1) TE 波:由

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+(k^2-k_z^2)\right]H_z(x,y)=0 \tag{9.5.6}$$

显然 H_z 的表达式为

$$H_z(x,y)=(A_1\sin k_x x+A_2\cos k_x x)(B_1\sin k_y y+B_2\cos k_y y) \tag{9.5.7}$$

且其中 $k_x^2+k_y^2=k_c^2$. 于是由(9.5.5)得

$$E_x=\frac{\mathrm{i}\omega\mu_0}{k_c^2}\frac{\partial H_z}{\partial y}=\frac{\mathrm{i}\omega\mu_0}{k_c^2}k_y(A_1\sin k_x x+A_2\cos k_x x)(B_1\cos k_y y-B_2\sin k_y y)$$

$$E_y = -\frac{i\omega\mu_0}{k_c^2}\frac{\partial H_z}{\partial x} = -\frac{i\omega\mu_0}{k_c^2}k_x(A_1\cos k_x x - A_2\sin k_x x)(B_1\sin k_y y + B_2\cos k_y y)$$

由管壁边界条件:电场的切向分量为零

$$E_x\big|_{\substack{y=0\\y=b}} = 0;\quad E_y\big|_{\substack{x=0\\x=a}} = 0 \tag{9.5.8}$$

得 $A_1 = B_1 = 0$,并且

$$k_x = \frac{m\pi}{a};\quad k_y = \frac{n\pi}{b}\quad (m,n = 0,1,2,3,\cdots) \tag{9.5.9}$$

故得到电场和磁场矢量分量的表达式

$$\begin{aligned}
H_z &= H_0\cos\frac{m\pi}{a}\cos\frac{n\pi}{b}y\\
H_x &= -\frac{ik_z}{k_c^2}\left(\frac{m\pi}{a}\right)H_0\sin\frac{m\pi}{a}x\cos\frac{n\pi}{b}y\\
H_y &= -\frac{ik_z}{k_c^2}\left(\frac{n\pi}{b}\right)H_0\cos\frac{m\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{b}y
\end{aligned} \tag{9.5.10}$$

$$\begin{aligned}
E_x &= -\frac{i\omega\mu_0}{k_c^2}\left(\frac{n\pi}{b}\right)H_0\cos\frac{m\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{b}y\\
E_y &= \frac{i\omega\mu_0}{k_c^2}\left(\frac{m\pi}{a}\right)H_0\sin\frac{m\pi}{a}x\cos\frac{n\pi}{b}y\\
E_z &= 0
\end{aligned} \tag{9.5.11}$$

其中 $H_0 = A_2B_2$ 为本征模的归一化常数.

(2) TM 波:显然 E_z 的表达式也为

$$E_z(x,y) = (A_1\sin k_x x + A_2\cos k_x x)(B_1\sin k_y y + B_2\cos k_y y) \tag{9.5.12}$$

直接代入边界条件方程(9.5.8)得到 $A_2 = B_2 = 0$,以及

$$k_x = \frac{m\pi}{a};\quad k_y = \frac{n\pi}{b}\quad (m,n = 0,1,2,3,\cdots) \tag{9.5.13}$$

令 $E_0 = A_1B_1$

$$E_z(x,y) = E_0\sin\frac{m\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{b}y \tag{9.5.14}$$

由方程(9.5.5)不难得到 E_x,E_y,H_x 和 H_y.

讨论:

1. 对矩形波导,本征模式由(m,n)决定,一般 TE 波记为 TE_{mn},而 TM 波记为 TM_{mn}. 实际问题中,总是选取一个特定的模式来传送;

2. 由

$$k_z = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - \left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2\right]} \tag{9.5.15}$$

如果电磁波频率足够高,k_z 为实数,但当 $\omega \leqslant \omega_c$,$k_z$ 为虚数,电场和磁场很快就随 z

衰减，不能形成行波，其中 ω_c 称为**截止频率**

$$\omega_c = c\sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2} \tag{9.5.16}$$

对 TE 波，m 和 n 中有一个可以为零，因此 TE 波的最低截止频率由 a 或 b 的较大者决定；而对 TM 波，m 和 n 都应该大于零，因此最低截止频率由模式 TM_{11} 决定；

3. 电磁波的相速度为

$$v_p = \frac{\omega}{k_z} = \frac{c}{\sqrt{1 - \frac{1}{k^2}\left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2\right]}} > c \tag{9.5.17}$$

大于光速，但群速度

$$v_p = \frac{d\omega}{dk_z} = c\sqrt{1 - \frac{1}{k^2}\left[\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2\right]} < c \tag{9.5.18}$$

而群速度代表能量传播速度，所以与相对论不矛盾.

4. 波导中电磁场的分布：考虑最简单的 TE_{10} 模的场分量，即 $m=1$ 和 $n=0$，由式(9.5.10)，且取实部

$$\begin{aligned}
\overline{H}_x &= k_z\left(\frac{a}{\pi}\right)H_0 \sin\frac{\pi x}{a} \cdot \sin(k_z z - \omega t) \\
\overline{H}_z &= H_0 \cos\frac{\pi x}{a} \cdot \cos(k_z z - \omega t) \\
\overline{E}_y &= -\omega\mu_0\left(\frac{a}{\pi}\right)H_0 \sin\frac{\pi x}{a}\sin(k_z z - \omega t) \\
\overline{H}_y &= \overline{E}_x = \overline{E}_z = 0
\end{aligned} \tag{9.5.19}$$

利用方程(9.2.35)或(9.2.36)不难求出面电荷密度和面电流密度. 由上式可见：①电场平行于 y 轴方向，其大小沿 a 边作正弦变化，中间强两边弱，b 边方向没有变化；②磁场同样在 b 边方向没有变化，但在 a 边方向，$\overline{H}_x$ 作正弦变化，$\overline{H}_z$ 作余弦变化. 在两边 $x=0$ 和 a，只有 $\overline{H}_z$($\overline{H}_x$ 为零)且二者反相，在中间 $x=a/2$，只有 $\overline{H}_x$($\overline{H}_z$ 为零). 我们知道磁力线是闭合的，因此整个场的图像如图 9.5.1，由于 TE_{10} 模的电场和磁场与 y 轴无关，故图 9.5.1 画出了平行于 xOz 平面的某个剖面.

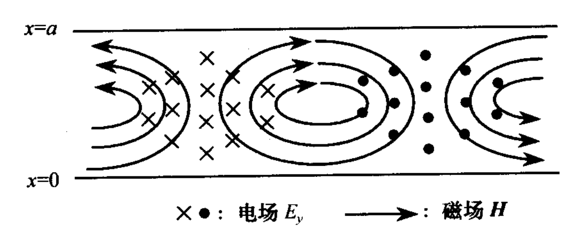


图 9.5.1 矩形波导 TE_{10} 模的电场和磁场分布

圆柱形波导:采用柱坐标讨论比较方便. 令波导柱轴方向为 z 方向,圆截面中心为原点,考虑 z 方向的行波

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{E}}(\rho,\varphi,z,t)&=\boldsymbol{E}(\rho,\varphi)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)]\\ \bar{\boldsymbol{H}}(\rho,\varphi,z,t)&=\boldsymbol{H}(\rho,\varphi)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)]\end{aligned}\tag{9.5.20}$$

代入波动方程(9.1.4)和(9.1.5)得到与坐标 ρ 和 φ 有关部分满足的方程

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+k_c^2\right]\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}(\rho,\varphi)\\ \boldsymbol{H}(\rho,\varphi)\end{bmatrix}=0\tag{9.5.21}$$

其中 $k_c^2=k^2-k_z^2$. 与矩形波导相同,可以得到用电磁场矢量的 z 方向分量 E_z 和 H_z 表示的4个横向分量 E_ρ、E_φ、H_ρ 和 H_φ

$$\begin{aligned}E_\rho&=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(k_z\frac{\partial E_z}{\partial\rho}+\frac{\omega\mu_0}{\rho}\frac{\partial H_z}{\partial\varphi}\right);\quad E_\varphi=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(\frac{k_z}{\rho}\frac{\partial E_z}{\partial\varphi}-\omega\mu_0\frac{\partial H_z}{\partial\rho}\right)\\ H_\rho&=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(-\frac{\omega\varepsilon_0}{\rho}\frac{\partial E_z}{\partial\varphi}+k_z\frac{\partial H_z}{\partial\rho}\right);\quad H_\varphi=\frac{\mathrm{i}}{k_c^2}\left(\omega\varepsilon_0\frac{\partial E_z}{\partial\rho}+\frac{k_z}{\rho}\frac{\partial H_z}{\partial\varphi}\right)\end{aligned}\tag{9.5.22}$$

而 z 方向的通解为

$$\begin{pmatrix}E_z\\ H_z\end{pmatrix}=[a_mJ_m(k_c\rho)+b_mN_m(k_c\rho)]\exp(\mathrm{i}m\varphi)\tag{9.5.23}$$

其中 J_m 和 N_m 分别为第一、第二类 Bessel 函数. 由原点 $r=0$ 有限条件得:$b_m=0$. 与矩形波导一样,圆柱形波导也只能传播 TE 或 TM 波.

1. 圆柱形波导中的 TE 波:$E_z=0$ 且有

$$H_z=a_mJ_m(k_c\rho)\exp(\mathrm{i}m\varphi)\tag{9.5.24}$$

上式代入(9.5.22)就可得到电磁场的其他四个分量. 在边界上,电场的切向分量为零,即 $E_\varphi|_{\rho=a}=0$,因此

$$\left.\frac{\mathrm{d}J_m(k_c\rho)}{\mathrm{d}\rho}\right|_{\rho=a}=0\tag{9.5.25}$$

设 x_{mn} 是 $J_m'(x)=0$ 的第 n 个根,那么 $k_c^{mn}=x_{mn}/a$,因此波矢量在 z 方向的分量为

$$k_z=\sqrt{k^2-(k_c^{mn})^2}=\sqrt{\omega^2\mu_0\varepsilon_0-\left(\frac{x_{mn}}{a}\right)^2}\tag{9.5.26}$$

故圆柱形波导 TE 波的截止频率为

$$\omega_c=\frac{x_{mn}}{a\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}}\tag{9.5.27}$$

2. 圆柱形波导中的 TM 波:$H_z=0$ 且有

$$E_z=a_mJ_m(k_c\rho)\exp(\mathrm{i}m\varphi)\tag{9.5.28}$$

由边界上电场的切向分量为零,即 $E_\varphi|_{\rho=a}=0$ 得到

$$J_m(k_c\rho)\,|_{\rho=a}=0\tag{9.5.29}$$

设 y_{mn} 是 $J_m(y)=0$ 的第 n 个根，那么 $k_c^{mn}=y_{mn}/a$，因此波矢量在 z 方向的分量为

$$k_z=\sqrt{k^2-(k_c^{mn})^2}=\sqrt{\omega^2\mu_0\varepsilon_0-\left(\frac{y_{mn}}{a}\right)^2} \tag{9.5.30}$$

故圆柱形波导 TM 波的截止频率为

$$\omega_c=\frac{y_{mn}}{a\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}} \tag{9.5.31}$$

$J_0(y)=0$ 的第一个根为 $y_{01}=2.405$，而 $J_0'(x)=0$ 的第一个根为 $x_{01}=3.832>y_{01}$，故 TM_{01} 是 TE 和 TM 波中截止频率最低的模式，它的场分布为

$$\begin{aligned}\bar{E}_z&=E_0J_0(k_c\rho)\exp[\mathrm{i}(k_zz-\omega t)]\\ \bar{E}_\rho&=\mathrm{i}\frac{k_z}{k_c}E_0J_0'(k_c\rho)\exp[\mathrm{i}(k_zz-\omega t)]\end{aligned} \tag{9.5.32a}$$

$$\begin{aligned}\bar{H}_\varphi&=\mathrm{i}\frac{\omega\varepsilon_0}{k_c}E_0J_0'(k_c\rho)\exp[\mathrm{i}(k_zz-\omega t)]\\ \bar{E}_\varphi&=\bar{H}_\rho=\bar{H}_z=0\end{aligned} \tag{9.5.32b}$$

其中 $k_c=2.405/a$ 和 $k_z=\sqrt{k^2-(k_c)^2}=\sqrt{\omega^2\mu_0\varepsilon_0-(2.405/a)^2}$. 从上式可见，磁场只有切向分量，形成闭合圆环；在横截面看，电场只有径向分量而无切向分量，故是原点附近发出的射线，从纵向截面看，因 $J_0(k_c\rho)$ 在 $\rho=0$ 处最大，故中心轴附近电场最大. 图 9.5.2 画出了 TM_{01} 模的场线分布.

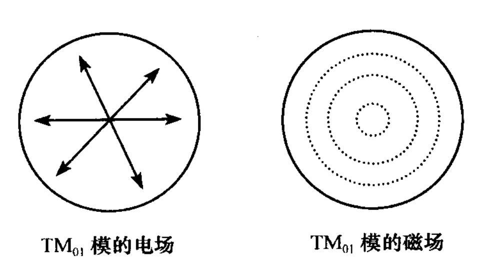


图 9.5.2　圆柱波导中的 TM_{01} 模的电场和磁场分布

习　题　9

9.1　太阳辐射到地球表面的能流密度为 $1.35\times10^3\,\mathrm{kW/m^2}$，计算下列物体受到的光压：(1) 理想导体板；(2) 完全吸收的板；(3) 理想导体小球；(4) 完全吸收的小球. 设太阳光是线偏振的平面单色光，对于平板，考虑垂直入射情况.

答案：(1) $p=2u=9.0\times10^{-6}\,\mathrm{N/m^2}$；

(2) $p=u=4.5\times10^{-6}\,\mathrm{N/m^2}$；

(3) $p=2u\cos^2\vartheta=9.0\times10^{-6}\cos^2\vartheta\,\mathrm{N/m^2}$；

(4) $p=u\cos^2\vartheta=4.5\times10^{-6}\cos^2\vartheta \text{N/m}^2$.

9.2　证明电磁波在介质分界面上反射和折射时能量守恒.(提示:证明反射系数与透射系数之和为 1)

9.3　单色平面电磁波由真空倾斜入射到非磁性的导体平面上,波的偏振方向与入射面成 α 角度,入射波为强度等于 I_0 的线偏振波,求反射波的强度和偏振态.(提示:入射波分解为平行与垂直入射面的两个正交分量,然后分别讨论它们的反射)

答案:$E_{\parallel}=E\cos\alpha, E_{\perp}=E\sin\alpha$

$$I=E'^2_{\parallel}+E'^2_{\perp}=E^2(|r_{\parallel}|^2\cos^2\alpha+|r_{\perp}|^2\sin^2\alpha)$$
$$=I_0(|r_{\parallel}|^2\cos^2\alpha+|r_{\perp}|^2\sin^2\alpha)$$

一般为椭圆偏振.

9.4　平面电磁波垂直入射到金属表面,证明透射到金属内部的电磁波能量全部转变为 Joule 热.(提示:平均能流

$$\langle \boldsymbol{S}_e\cdot\boldsymbol{e}_n\rangle=\langle(\boldsymbol{E}''\times\boldsymbol{H}'')\cdot\boldsymbol{e}_n\rangle=\frac{\sigma E_0^2}{4\beta}\exp(-\beta z)$$

金属内的平均消耗功率为 $w=\langle\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E}''\rangle=\sigma\langle\boldsymbol{E}''\cdot\boldsymbol{E}''\rangle$,单位面积消耗的总能量为 $W=\int_0^\infty w\mathrm{d}z=\frac{\sigma E_0^2}{4\beta}$)

9.5　考虑无限大平面分层电介质,中间层的厚度为 d(介电常量为 ε_2),两边介电常量分别为 ε_1 和 ε_3,电磁波由 ε_1 介质入射到界面,当 d 为多少时,反射最小?(提示:设入射波为线偏振波且为正入射,反射系数为 $R=\left|\frac{a_{12}+a_{23}\exp(2\mathrm{i}k_2d)}{1+a_{12}a_{23}\exp(2\mathrm{i}k_2d)}\right|$,

$a_{12}=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}=\frac{n_1-n_2}{n_1+n_2}, a_{23}=\frac{n_2-n_3}{n_2+n_3}$)

答案:当 $d=(2m+1)\lambda_2/4$ 时,R 极小,当 $\varepsilon_2=\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_3}$ 时,$R=0$.

9.6　平面电磁波

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{e}_yE_0\sin(kz-\omega t+\phi_0)$$

由真空正入射到理想导体平面上,求空间电磁场分布、导体表面的电流分布及辐射压力.(提示:理想导体内电磁场为零)

答案:$\boldsymbol{E}_r(\boldsymbol{r},t)=-\boldsymbol{e}_yE_0\sin(-kz-\omega t+\phi_0)$,

$$\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{e}_n\times\boldsymbol{H}=\mu_0^{-1}\boldsymbol{e}_z\times(\boldsymbol{B}_i+\boldsymbol{B}_r)\big|_{z=0}=-\frac{2E_0}{\mu_0c}\sin(\omega t-\phi_0)\boldsymbol{e}_y,$$

$$\boldsymbol{f}=-\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{e}_n^{\mathrm{T}}=-\frac{B^2}{2\mu_0}\boldsymbol{e}_z=-\frac{2E_0^2}{\mu_0c^2}\sin^2(\omega t-\phi_0)\boldsymbol{e}_z,$$

$$\boldsymbol{p}=\langle\boldsymbol{f}\rangle=-\frac{2E_0^2}{\mu_0c^2}\langle\sin^2(\omega t-\phi_0)\rangle\boldsymbol{e}_z=-\varepsilon_0E_0^2\boldsymbol{e}_z.$$

9.7　一对无限大的平行理想导体板相距 d,电磁波沿着平行于板面的 z 方向

传播，求可能传播的波型的场分布及其相应的截止频率.(提示：设电磁波在 y 方向均匀，存在三种波，即 TE 波、TM 波和 TEM 波).

答案：对 TE 波和 TM 波，$\omega=n\pi c/d$；TEM 波是平面波：

$$E_x = E_0\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)],\quad E_y = E_z = 0$$

$$B_y = \frac{k}{\omega}E_0\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)],\quad B_x = B_z = 0.$$

9.8 无限长矩形波导在 $z=0$ 处被一块垂直插入的理想导体板完全封闭，求在 $z=0$ 和 $z=\infty$ 这段管内的可能波型.(提示：在 $z=0$ 处增加了边界条件，z 方向的行波解变成驻波解)

9.9 矩形波导尺寸为 $a\times b$，电磁波沿 z 方向传播，设电场的一个分量为

$$E_x = E_0\sin\left(\frac{\pi y}{b}\right)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)]$$

求其他场分量.(提示 E_x 与 x 无关，其他场分量也应该与 x 无关)

答案：

$$B_z = B_0\cos\left(\frac{\pi y}{b}\right)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)];\quad B_x = E_y = 0$$

$$B_y = -\mathrm{i}\,\frac{b}{\pi}k_z B_0\sin\left(\frac{\pi y}{b}\right)\exp[\mathrm{i}(k_z z-\omega t)];\quad B_0 = \mathrm{i}\,\frac{\pi}{b}\,\frac{E_0}{\omega}.$$

9.10 线偏振光 $E_x(z,t)=E_0\exp[\mathrm{i}(kz-\omega t)]$ 正入射到一对左、右旋圆偏振光的折射率分别为 n_l 和 n_r 的物质上，计算反射光的强度和偏振态.(提示：入射光可分解为左、右旋圆偏振光的叠加(忽略传播因子)$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{e}_x E_0=E_0\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{2}E_0\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}+\frac{1}{2}E_0\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}$)

答案：

$$\boldsymbol{E}' = \frac{1}{2}E_0\,\frac{1-n_r}{1+n_r}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}+\frac{1}{2}E_0\,\frac{1-n_l}{1+n_l}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}E_0\begin{bmatrix}\dfrac{1-n_r}{1+n_r}+\dfrac{1-n_l}{1+n_l}\\ \mathrm{i}\left(\dfrac{1-n_r}{1+n_r}-\dfrac{1-n_l}{1+n_l}\right)\end{bmatrix}$$

反射光为椭圆偏振波，强度比为

$$\frac{I_x}{I_y}=\frac{1}{4}\left[\left(\frac{1-n_r}{1+n_r}+\frac{1-n_l}{1+n_l}\right)^2+\left(\frac{1-n_r}{1+n_r}-\frac{1-n_l}{1+n_l}\right)^2\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{1-n_r}{1+n_r}\right)^2+\left(\frac{1-n_l}{1+n_l}\right)^2\right].$$

第 10 章　电磁波的辐射

上一章我们介绍了电磁波的传播，即假定电磁波已经存在，从而分析电磁波的传播特性. 本章介绍电磁波是如何产生的，即电磁波的辐射问题. 在研究辐射问题时，用电磁场的矢量势和标量势描述较方便，因此首先介绍矢量势和标量势概念.

10.1　矢量势、标量势和规范不变性

首先写出真空中的 Maxwell 方程组

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\frac{\rho}{\varepsilon_0};\quad \nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\tag{10.1.1}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\left(\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right)\tag{10.1.2}$$

从$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$，我们知道 $\boldsymbol{B}$ 一定是某个矢量势 $\boldsymbol{A}$ 的旋度（与静态场类似，但意义大不一样），即 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$；而由方程(10.1.1)的第二式

$$\nabla\times\left(\boldsymbol{E}+\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)=0\tag{10.1.3}$$

故 $E+\partial\boldsymbol{A}/\partial t$ 一定是某个标量势的梯度，即

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\tag{10.1.4}$$

上式代入方程(10.1.1)的第一式得

$$\nabla^2\Phi+\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\boldsymbol{A}=-\frac{\rho}{\varepsilon_0}\tag{10.1.5}$$

将 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 代入方程(10.1.2)的第二式

$$\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{A})=\mu_0\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\mu_0\frac{\partial}{\partial t}\left(-\nabla\Phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)\tag{10.1.6}$$

令 $c=1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$，并利用矢量恒等式$\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{A})=\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})-\nabla^2\boldsymbol{A}$，得到

$$\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})-\nabla^2\boldsymbol{A}=\mu_0\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\mu_0\frac{\partial}{\partial t}\left(-\nabla\Phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)\tag{10.1.7}$$

即

$$\nabla^2\boldsymbol{A}-\nabla\left(\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=-\mu_0\boldsymbol{j}\tag{10.1.8}$$

方程(10.1.5)和(10.1.8)就是矢量势和标量势满足的方程. 这两个方程相互耦合，

求解比较困难. 能否进一步简化? 因为对应 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$,可有无限多个的 $\boldsymbol{A}$ 和 Φ. 事实上,作变换

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\chi; \quad \Phi' = \Phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \tag{10.1.9}$$

式中 χ 是满足一定微分条件的任意标量函数,求得的 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都一样

$$\boldsymbol{B}' = \nabla\times\boldsymbol{A}' = \nabla\times\boldsymbol{A} + \nabla\times\nabla\chi = \nabla\times\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}' &= -\nabla\Phi' - \frac{\partial \boldsymbol{A}'}{\partial t} = -\nabla\left(\Phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}\right) - \frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{A} + \nabla\chi) \\ &= -\nabla\Phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} = \boldsymbol{E}\end{aligned} \tag{10.1.10}$$

电磁场在这样的变换下的不变性称为**规范不变性**. 可见矢量势和标量势的选择不是唯一的,可以对它们加上一定的附加条件,这种附加条件称为**规范**. 如果我们选择附加条件满足

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi}{\partial t} = 0 \tag{10.1.11}$$

称为 **Lorentz 规范**,那么 χ 满足方程

$$\nabla^2\chi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\chi}{\partial t^2} = 0 \tag{10.1.12}$$

在 Lorentz 规范下,矢量势和标量势满足的波动方程具有对称的形式

$$\nabla^2\Phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{10.1.13}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2} = -\mu_0\boldsymbol{j} \tag{10.1.14}$$

附加条件也可以选择为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0, \quad \nabla^2\chi = 0 \tag{10.1.15}$$

称为 **Coulomb 规范**. 在 Coulomb 规范下,波动方程为

$$\nabla^2\boldsymbol{A} - \nabla\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2} = -\mu_0\boldsymbol{j} \tag{10.1.16}$$

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{10.1.17}$$

选择 Coulomb 规范的意义:在无源情况下 $\boldsymbol{j}=0,\rho=0$,标量势显然满足 Laplace 方程,在无界空间,满足 Laplace 方程的标量势必为常数,不失一般性,可取这个常数为零 $\Phi=0$. 于是电磁场可用单一的矢量势描写,而且 $\boldsymbol{A}$ 满足齐次波动方程,这一结论在第 22.4 节中要用到.

无界空间的辐射问题就是求非齐次方程(10.1.13)和(10.1.14)的特解,而不考虑方程的初始条件. 如果定义 Green 函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t,t')$满足方程

$$\left[\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right]G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t,t')=-\delta(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\delta(t,t') \tag{10.1.18}$$

那么方程(10.1.13)的特解为

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\int_V \rho(\boldsymbol{r}',t')G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t,t')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\mathrm{d}t' \tag{10.1.19}$$

因此关键是求 Green 函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t,t')$. 方程(10.1.18)的解可表示为

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';t,t')=\frac{H(t-t')}{4\pi\,|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\delta[\,|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|-c(t-t')] \tag{10.1.20}$$

其中 $H(t)$为阶跃函数,代入方程(10.1.19)得

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_0^t\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\delta[\,|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|-c(t-t')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\mathrm{d}t' \tag{10.1.21}$$

对时间部分积分得到

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t-|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|/c)}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.1.22}$$

称为**推迟势**,$t-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/c$ 称为**推迟时间**. 对矢量势方程(10.1.14),在直角坐标系内,每个分量都满足标量势方程,因此

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t-|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|/c)}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.1.23}$$

方程(10.1.22)和(10.1.23)表明:观察点(x,y,z)的电磁场是由(x',y',z')点在时刻 $t-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/c$ 的电荷和电流决定的,或者说,空间一点(x',y',z')处的电荷、电流元产生的电磁波以光速经过一定时间间隔$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/c$ 传播到观察点(x,y,z),这种推迟效应说明电磁波在真空中是以有限的速度 c(即光速)传播的.

10.2　电偶极矩辐射、辐射场和角分布

根据 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 和式(10.1.4),原则上可从式(10.1.22)和(10.1.23)求出电场和磁场,但这非常困难,也不能给出一般性规律. 如果源分布在一个小区域,如图 10.2.1,可以作多极展开. 为了方便,重写式(10.1.22)和(10.1.23)

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{[\rho]}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.2.1}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{[\boldsymbol{j}]}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.2.2}$$

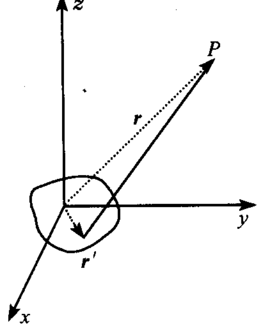


图 10.2.1　辐射场的多极展开

上式中[ ]表示推迟势. 注意:与静电场展开的区别,这里$[\rho]$和$[\boldsymbol{j}]$也是$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$的函数,故必须对$[\rho]$和$[\boldsymbol{j}]$也作展开. 在原点作展开

$$\frac{[\rho]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}-\boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}+\frac{1}{2!}\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}+\cdots \tag{10.2.3}$$

其中$[\rho]_0=\rho(\boldsymbol{r}',t-|\boldsymbol{r}|/c)$,同理可得

$$\frac{[\boldsymbol{j}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}-\boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}+\frac{1}{2!}\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}+\cdots \tag{10.2.4}$$

其中$[\boldsymbol{j}]_0=\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t-|\boldsymbol{r}|/c)$. 故

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\int_V\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'-\int_V\boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'+\frac{1}{2!}\int_V\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'+\cdots\right] \tag{10.2.5}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\left[\int_V\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'-\int_V\boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'+\frac{1}{2!}\int_V\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'+\cdots\right] \tag{10.2.6}$$

分析以上展开各项:

(1) 标量势的第一项

$$\Phi_0(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}|}\int_V[\rho]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{Q}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}|} \tag{10.2.7}$$

其中Q是系统的总电荷,因此第一项相当于位于原点的点电荷产生的场,对辐射没有贡献;

(2) 标量势的第二项

$$\Phi_1(\boldsymbol{r},t)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla\cdot\frac{[\boldsymbol{p}]_0}{|\boldsymbol{r}|} \tag{10.2.8}$$

注意:上式中∇只对$\boldsymbol{r}$作用,故与对$\boldsymbol{r}'$的积分可交换. 其中

$$[\boldsymbol{p}]_0=\int_V\boldsymbol{r}'[\rho]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.2.9}$$

表示系统的电偶极矩;

(3) 矢量势的第一项

$$\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\int_V[\boldsymbol{j}]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{\mu_0[\dot{\boldsymbol{p}}]_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|} \tag{10.2.10}$$

最后一个等式是因为电流密度是电荷运动产生的,即

$$[\boldsymbol{j}]_0=[\rho\boldsymbol{v}]_0=\sum_i e_i\boldsymbol{v}_i\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_i) \tag{10.2.11}$$

故

$$\int_V[\boldsymbol{j}]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\int_V\sum_i e_i\boldsymbol{v}_i\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_i)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\sum_i e_i\boldsymbol{r}_i(t')=[\dot{\boldsymbol{p}}]_0 \tag{10.2.12}$$

注意:在静磁场的多极展开中,由于稳恒电流条件$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$,展开式第一项为零,而

现在讨论辐射问题，没有条件$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$. 因此，在一级近似下，电磁场主要由电偶极矩产生，标量势和矢量势为

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla\cdot\frac{[\boldsymbol{p}]_0}{|\boldsymbol{r}|};\quad \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0[\dot{\boldsymbol{p}}]_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\tag{10.2.13}$$

根据$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$和式(10.1.4)，得到电偶极矩的场强为

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0}{4\pi}\nabla\times\frac{[\dot{\boldsymbol{p}}]_0}{|\boldsymbol{r}|};\quad \boldsymbol{E}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\nabla\nabla\cdot\frac{[\boldsymbol{p}]_0}{|\boldsymbol{r}|}-\frac{1}{c^2}\frac{[\ddot{\boldsymbol{p}}]_0}{|\boldsymbol{r}|}\right)\tag{10.2.14}$$

注意到推迟时间是$\boldsymbol{r}$的函数：$t'=t-|\boldsymbol{r}|/c$，故有下列微分关系

$$\nabla\times\boldsymbol{g}(t')=\nabla t'\times\frac{\partial\boldsymbol{g}}{\partial t'};\quad \nabla\cdot\boldsymbol{g}(t')=\nabla t'\cdot\frac{\partial\boldsymbol{g}}{\partial t'}\tag{10.2.15}$$

$$\nabla t'=\nabla\left(t-\frac{|\boldsymbol{r}|}{c}\right)=-\frac{1}{c}\nabla|\boldsymbol{r}|=-\frac{1}{c}\frac{\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r}|}=-\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_r\tag{10.2.16}$$

其中$\boldsymbol{e}_r$是$\boldsymbol{r}$方向的单位矢量. 利用以上微分关系，方程(10.2.14)变成

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{[\dot{\boldsymbol{p}}]_0}{|\boldsymbol{r}|^2}+\frac{[\ddot{\boldsymbol{p}}]_0}{c|\boldsymbol{r}|}\right]\times\boldsymbol{e}_r\tag{10.2.17}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\Bigg\{&\left[\frac{3([\boldsymbol{p}]_0\cdot\boldsymbol{e}_r)\boldsymbol{e}_r-[\boldsymbol{p}]_0}{|\boldsymbol{r}|^3}\right]\\&+\left[\frac{3([\dot{\boldsymbol{p}}]_0\cdot\boldsymbol{e}_r)\boldsymbol{e}_r-[\dot{\boldsymbol{p}}]_0}{c|\boldsymbol{r}|^2}\right]+\frac{\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times[\ddot{\boldsymbol{p}}]_0)}{c^2|\boldsymbol{r}|}\Bigg\}\end{aligned}\tag{10.2.18}$$

分析上式：假定电偶极矩对时间的依赖关系为$\exp(-\mathrm{i}\omega t)$，对时间的一阶导数为$-\mathrm{i}\omega\exp(-\mathrm{i}\omega t)$，而$\omega/c=2\pi/\lambda$（$\lambda$为辐射场波长），式(10.2.17)和(10.2.18)中，后一项比前一项多一个$-\mathrm{i}\omega$因子，因此后一项与前一项之比大约为

$$\frac{\omega/c}{1/|\boldsymbol{r}|}=\frac{2\pi|\boldsymbol{r}|}{\lambda}\sim\frac{|\boldsymbol{r}|}{\lambda}\tag{10.2.19}$$

下面分三个区域来讨论：

1. 近区：满足$|\boldsymbol{r}|\ll\lambda$，但仍然有$|\boldsymbol{r}|\gg l$（$l$为源的线度），式(10.2.17)和(10.2.18)近似为

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0[\dot{\boldsymbol{p}}]_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|^2}\times\boldsymbol{e}_r;\quad \boldsymbol{E}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3([\boldsymbol{p}]_0\cdot\boldsymbol{e}_r)\boldsymbol{e}_r-[\boldsymbol{p}]_0}{|\boldsymbol{r}|^3}\tag{10.2.20}$$

电磁场能流随$1/|\boldsymbol{r}|^5$衰减而无法传播，因此叫**静场区**. 在辐射问题中，我们对静场区不感兴趣；

2. 中区：$|\boldsymbol{r}|\sim\lambda$，但仍然有$|\boldsymbol{r}|\gg l$，式(10.2.17)和(10.2.18)每项都在同一数量级，这一区域称为**感应区**，场强颇为复杂；

3. 远区：不仅要求$|\boldsymbol{r}|\gg l$而且$|\boldsymbol{r}|\gg\lambda$，式(10.2.17)和(10.2.18)近似为

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0[\ddot{\boldsymbol{p}}]_0}{4\pi c|\boldsymbol{r}|}\times\boldsymbol{e}_r;\quad \boldsymbol{E}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times[\ddot{\boldsymbol{p}}]_0)}{c^2|\boldsymbol{r}|}\tag{10.2.21}$$

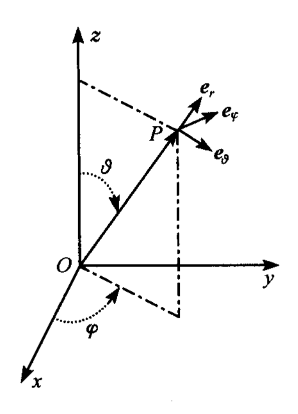


图 10.2.2　场点 P 的单位矢量关系

场强随 $1/|\boldsymbol{r}|$ 衰减，电磁场能流随 $1/|\boldsymbol{r}|^2$ 衰减，因而通过一个球面的能量为常量，可以脱离源向很远处传播，故称为**辐射场**.

由于式(10.2.21)中电场和磁场都与电偶极矩有关，因此称为**电偶极辐射**.

例 10.2.1　电偶极矩辐射的总功率.

解：　由方程(10.2.21)可知，磁场 $\boldsymbol{B}$ 和电场 $\boldsymbol{E}$ 垂直于 $\boldsymbol{e}_r$ 且 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 相互垂直，满足电磁波的横波特性. 假定电偶极矩位于 z 轴方向：$[\ddot{\boldsymbol{p}}]_0=[\ddot{p}]_0\boldsymbol{e}_z$，则 $\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{e}_r=\boldsymbol{e}_\varphi$，$\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_\varphi=\boldsymbol{e}_\vartheta$(如图 10.2.2)即

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{E} &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{[\ddot{p}]_0}{c^2\,|\,\boldsymbol{r}\,|}\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta \\
\boldsymbol{B} &= \frac{\mu_0[\ddot{p}]_0}{4\pi c\,|\,\boldsymbol{r}\,|}\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi
\end{aligned}
\tag{10.2.22}
$$

电偶极辐射的平均能流密度为

$$
\langle \boldsymbol{S}_\mathrm{e}\rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^*\times\boldsymbol{H}) = \frac{|\,[\ddot{p}]_0\,|^2}{32\pi^2\varepsilon_0 c^3\,|\,\boldsymbol{r}\,|^2}\sin^2\vartheta\boldsymbol{e}_r \tag{10.2.23}
$$

可见辐射具有方向性，在平行于电偶极矩的方向，辐射为零，而在垂直方向 $\vartheta=\pi/2$，辐射最强. 电偶极矩辐射的总功率为

$$
\begin{aligned}
\langle P\rangle &= \iint_S\langle \boldsymbol{S}_\mathrm{e}\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S} = \frac{|\,[\ddot{p}]_0\,|^2}{32\pi^2\varepsilon_0 c^3}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\sin^2\vartheta\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta \\
&= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{|\,[\ddot{p}]_0\,|^2}{3c^3}
\end{aligned}
\tag{10.2.24}
$$

如果电偶极矩是由随时间正弦变化的短电流产生的，即

$$
\dot{p} = \int j\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_{-l/2}^{l/2} I(z)\mathrm{d}z = I_0 l\exp(-\mathrm{i}\omega t) \tag{10.2.25}
$$

其中 l 为短电流的长度. 则

$$
[\ddot{p}]_0 = -\mathrm{i}\omega I_0 l\exp[-\mathrm{i}\omega(t-r/c)] \tag{10.2.26}
$$

辐射功率为

$$
\langle P\rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{I_0^2 l^2\omega^2}{3c^3} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{I_0^2}{3c}\left(\frac{2\pi l}{\lambda}\right)^2 \sim \left(\frac{l}{\lambda}\right)^2 \tag{10.2.27}
$$

所以电偶极矩的辐射功率正比于 l/λ 的平方，而我们已假定 $l/\lambda\ll 1$，故辐射功率很小，为了提高辐射功率，必须加大 l/λ.

我们也经常用角分布的概念来描述体系向不同方向辐射能量的情况，定义角分布函数

$$f(\vartheta,\varphi)\equiv\frac{\langle \boldsymbol{S}_e\rangle\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\langle \boldsymbol{S}_e\rangle\cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}S}{\mathrm{d}\Omega} \tag{10.2.28}$$

显然它表示 ϑ,φ 方向单位立体角内的平均能流.

10.3　磁偶极矩辐射和电四极矩辐射

当系统的电偶极辐射为零时,多极展开中必须考虑更高阶的项.由多极展开公式(10.2.5)和(10.2.6),标量势的第三项和矢量势的第二项为

$$\begin{aligned}\Phi_2(\boldsymbol{r},t)&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2!}\int_V \boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla\frac{[\rho]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\ \boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{r},t)&=-\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \boldsymbol{r}'\cdot\nabla\frac{[\boldsymbol{j}]_0}{|\boldsymbol{r}|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned} \tag{10.3.1}$$

因为我们关心的是辐射场,上式可以略去 $1/|\boldsymbol{r}|$ 高阶项,凡是微分号下的 $1/|\boldsymbol{r}|$ 都可作为常数提出来.先看标量势

$$\begin{aligned}\Phi_2(\boldsymbol{r},t)&\approx\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2|\boldsymbol{r}|}\int_V \boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}':\nabla\nabla[\rho]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{6|\boldsymbol{r}|}\\ &\cdot\left[\nabla\nabla:\int_V 3\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}'[\rho]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right]=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{6|\boldsymbol{r}|}\nabla\nabla:[\boldsymbol{Q}]_0\end{aligned} \tag{10.3.2}$$

式中 $\boldsymbol{Q}$ 为电四极矩

$$[\boldsymbol{Q}]_0=\int_V 3\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}'[\rho]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.3.3}$$

利用微分关系

$$\nabla\nabla:[\boldsymbol{Q}]_0=\frac{1}{c^2}\boldsymbol{e}_r\boldsymbol{e}_r:[\ddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \tag{10.3.4}$$

方程(10.3.2)变成

$$\Phi_2(\boldsymbol{r},t)\approx\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{6c^2|\boldsymbol{r}|}\boldsymbol{e}_r\boldsymbol{e}_r:[\ddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \tag{10.3.5}$$

再看矢量势

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{r},t)&\approx-\frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\nabla\cdot\int_V \boldsymbol{r}'[\boldsymbol{j}]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\\ &=-\frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\nabla\cdot\left(\int_V\frac{1}{2}[\boldsymbol{r}'\boldsymbol{j}+\boldsymbol{j}\boldsymbol{r}']_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'+\int_V\frac{1}{2}[\boldsymbol{r}'\boldsymbol{j}-\boldsymbol{j}\boldsymbol{r}']_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right)\end{aligned} \tag{10.3.6}$$

注意到

$$[\boldsymbol{j}]_0=[\rho\boldsymbol{v}]_0=\dot{\boldsymbol{r}}'[\rho]_0 \tag{10.3.7}$$

$$\frac{1}{2}\int_V[\boldsymbol{r}'\boldsymbol{j}+\boldsymbol{j}\boldsymbol{r}']_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\frac{1}{6}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\int_V 3\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}'[\rho]_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right\}=\frac{1}{6}[\dot{\boldsymbol{Q}}]_0 \tag{10.3.8}$$

以及

$$\nabla \cdot [\boldsymbol{r}'\boldsymbol{j} - \boldsymbol{j}\boldsymbol{r}']_0 = -\nabla \times \{[\boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{j}]_0\} \tag{10.3.9}$$

代入方程(10.3.6)得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{r},t) &\approx -\frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\left\{\frac{1}{6}\nabla \cdot [\dot{\boldsymbol{Q}}]_0 - \frac{1}{2}\int_V \nabla \times \{[\boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{j}]_0\}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right\} \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\left\{\frac{1}{6}\nabla \cdot [\dot{\boldsymbol{Q}}]_0 - \frac{1}{2}\nabla \times \int_V \{[\boldsymbol{r}' \times \boldsymbol{j}]_0\}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right\} \\ &= -\frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\left\{\frac{1}{6}\nabla \cdot [\dot{\boldsymbol{Q}}]_0 - \nabla \times [\boldsymbol{m}]_0\right\}\end{aligned} \tag{10.3.10}$$

而由式(10.2.15)和(10.2.16)

$$\begin{aligned}\nabla \cdot [\dot{\boldsymbol{Q}}]_0 &= \nabla t' \cdot \frac{\partial [\dot{\boldsymbol{Q}}]_0}{\partial t'} = -\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_r \cdot [\ddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \\ \nabla \times [\boldsymbol{m}]_0 &= \nabla t' \times [\dot{\boldsymbol{m}}]_0 = -\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_r \times [\dot{\boldsymbol{m}}]_0\end{aligned} \tag{10.3.11}$$

代入方程(10.3.10)得到

$$\boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{r},t) \approx \frac{\mu_0}{4\pi|\boldsymbol{r}|}\left\{\frac{1}{6c}[\ddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \cdot \boldsymbol{e}_r + \frac{1}{c}[\dot{\boldsymbol{m}}]_0 \times \boldsymbol{e}_r\right\} \tag{10.3.12}$$

从上式和(10.3.5),可以求出磁偶极矩和电四极矩辐射的电场和磁场,分别讨论如下.

1. 磁偶极矩辐射:势函数为

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = 0;\quad \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi c|\boldsymbol{r}|}[\dot{\boldsymbol{m}}]_0 \times \boldsymbol{e}_r \tag{10.3.13}$$

电磁辐射场为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E} &= -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^3|\boldsymbol{r}|}\boldsymbol{e}_r \times [\ddot{\boldsymbol{m}}]_0 \\ \boldsymbol{B} &= \nabla \times \boldsymbol{A} = \frac{\mu_0}{4\pi c^2|\boldsymbol{r}|}\boldsymbol{e}_r \times (\boldsymbol{e}_r \times [\ddot{\boldsymbol{m}}]_0)\end{aligned} \tag{10.3.14}$$

辐射能流的平均值为

$$\langle \boldsymbol{S}_e \rangle = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^* \times \boldsymbol{H}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{8\pi c^5|\boldsymbol{r}|^2}|(\boldsymbol{e}_r \times [\ddot{\boldsymbol{m}}]_0)|^2\boldsymbol{e}_r \tag{10.3.15}$$

2. 电四极矩辐射:势函数为

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{6c^2|\boldsymbol{r}|}\boldsymbol{e}_r\boldsymbol{e}_r : [\ddot{\boldsymbol{Q}}]_0;\quad \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{1}{6c|\boldsymbol{r}|}[\ddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \cdot \boldsymbol{e}_r \tag{10.3.16}$$

电磁辐射场为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E} &= -\nabla\Phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} = \frac{1}{24\pi\varepsilon_0 c^3}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}\{(\boldsymbol{e}_r\boldsymbol{e}_r : [\dddot{\boldsymbol{Q}}]_0)\boldsymbol{e}_r - [\dddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \cdot \boldsymbol{e}_r\} \\ \boldsymbol{B} &= \nabla \times \boldsymbol{A} = -\frac{\mu_0}{24\pi c^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}\boldsymbol{e}_r \times ([\dddot{\boldsymbol{Q}}]_0 \cdot \boldsymbol{e}_r)\end{aligned} \tag{10.3.17}$$

若记$[\boldsymbol{Q}]_0\cdot\boldsymbol{e}_r=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{e}_r)$，上式简化为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}&=\frac{1}{24\pi\varepsilon_0c^3}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}([\dddot{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{e}_r)]_0\times\boldsymbol{e}_r)\times\boldsymbol{e}_r\\ \boldsymbol{B}&=\frac{1}{24\pi\varepsilon_0c^4}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}([\dddot{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{e}_r)]_0\times\boldsymbol{e}_r)\end{aligned}\tag{10.3.18}$$

辐射能流的平均值为

$$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^*\times\boldsymbol{H})=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{288\pi c^5|\boldsymbol{r}|^2}|[\dddot{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{e}_r)]_0\times\boldsymbol{e}_r|^2\tag{10.3.19}$$

例 10.3.1　磁偶极矩辐射的总功率.

解:　假定磁偶极矩位于z轴方向，$[\ddot{\boldsymbol{m}}]_0=[\ddot{m}]_0\boldsymbol{e}_z$，由方程(10.3.14)

$$\boldsymbol{E}=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0c^3|\boldsymbol{r}|}[\ddot{m}]_0\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi;\quad \boldsymbol{B}=\frac{\mu_0}{4\pi c^2|\boldsymbol{r}|}[\ddot{m}]_0\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta\tag{10.3.20}$$

磁偶极辐射的平均能流密度为

$$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^*\times\boldsymbol{H})=\frac{|[\ddot{m}]_0|^2}{32\pi^2\varepsilon_0c^5|\boldsymbol{r}|^2}\sin^2\vartheta\boldsymbol{e}_r\tag{10.3.21}$$

如果磁偶极矩是由半径为a，电流为$I=I_0\exp(-\mathrm{i}\omega t)$的小圆环产生的，那么

$$[\ddot{m}]_0=-\omega^2I_0\pi a^2\exp[-\mathrm{i}\omega(t-r/c)]\tag{10.3.22}$$

代入式(10.3.21)

$$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\frac{\omega^4I_0^2a^2}{32\varepsilon_0c^5|\boldsymbol{r}|^2}\sin^2\vartheta\boldsymbol{e}_r\tag{10.3.23}$$

辐射总功率为

$$\langle P\rangle=\frac{\omega^4I_0^2a^4}{12\pi^3\varepsilon_0c^5}=\frac{I_0^2}{12\pi^3\varepsilon_0c}\left(\frac{2\pi a}{\lambda}\right)^4\sim\left(\frac{a}{\lambda}\right)^4\tag{10.3.24}$$

所以磁偶极矩的辐射功率正比于a/λ的四次方，比电偶极矩辐射小$(a/\lambda)^2$数量级.

例 10.3.2　证明荷质比相同的不同带电粒子组成的体系不会有偶极辐射.

解:　体系的电偶极矩为

$$\boldsymbol{p}=\sum_{i=1}^{N}e_i\boldsymbol{r}_i=\sum_{i=1}^{N}\frac{e_i}{m_i}m_i\boldsymbol{r}_i\tag{10.3.25}$$

体系的质心坐标为

$$\boldsymbol{r}_c=\sum_{i=1}^{N}m_i\boldsymbol{r}_i\Big/\sum_{i=1}^{N}m_i\tag{10.3.26}$$

即

$$\sum_{i=1}^{N}m_i\boldsymbol{r}_i=\left(\sum_{i=1}^{N}m_i\right)\boldsymbol{r}_c=M\boldsymbol{r}_c\tag{10.3.27}$$

其中M为总质量. 因荷质比相同，由方程(10.3.25)

$$\boldsymbol{p}=\sum_{i=1}^{N}e_i\boldsymbol{r}_i=\frac{e_i}{m_i}M\boldsymbol{r}_c \tag{10.3.28}$$

故

$$\ddot{\boldsymbol{p}}=\sum_{i=1}^{N}e_i\ddot{\boldsymbol{r}}_i=\frac{e_i}{m_i}M\ddot{\boldsymbol{r}}_c \tag{10.3.29}$$

在无外力作用情况下，质心作匀速运动，即 $\ddot{\boldsymbol{r}}_c=0$，因此电偶极矩辐射为零. 该体系的磁偶极矩为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{m}&=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}e_i\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{v}_i=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{e_i}{m_i}m_i\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{v}_i\\&=\frac{1}{2}\frac{e_i}{m_i}\sum_{i=1}^{N}m_i\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{v}_i=\frac{1}{2}\frac{e_i}{m_i}\boldsymbol{L}\end{aligned} \tag{10.3.30}$$

而 $\boldsymbol{L}$ 是体系的动量矩，在没有外力矩情况下，体系的动量矩守恒. 故 $\ddot{\boldsymbol{m}}=0$，因此体系也不存在磁偶极矩辐射.

10.4 运动电荷的辐射场与辐射阻尼

本节讨论运动点电荷产生的场和电磁辐射问题. 假定空间只有一个带电粒子，位置矢量为 $\boldsymbol{r}_e$，则运动带电粒子产生的电荷密度和电流密度可表示为

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=e\delta[\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_e(t)];\quad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=e\boldsymbol{v}(t)\delta[\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_e(t)] \tag{10.4.1}$$

带电粒子的速度矢量为 $\boldsymbol{v}(t)=\dot{\boldsymbol{r}}_e(t)$. 代入方程(10.2.1)和(10.2.2)得到

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{[e\delta(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e)]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.4.2}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{[e\boldsymbol{v}\delta(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e)]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{10.4.3}$$

因此问题的关键是求上述积分，注意到

$$\begin{aligned}[e\boldsymbol{v}\delta(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e)]&=e\boldsymbol{v}(t')\delta[\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e(t')]\,|_{t'=t-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/c}\\&=\int_{-\infty}^{t}e\boldsymbol{v}(t')\delta[\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e(t')]\delta\left(t'-t+\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}\right)\mathrm{d}t'\end{aligned} \tag{10.4.4}$$

代入方程(10.4.2)和(10.4.3)

$$\begin{aligned}\Phi(\boldsymbol{r},t)&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\int_{-\infty}^{t}\frac{e\delta[\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e(t')]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\delta\left(t'-t+\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\mathrm{d}t'\\\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)&=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\int_{-\infty}^{t}\frac{e\boldsymbol{v}(t')\delta[\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_e(t')]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\delta\left(t'-t+\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\mathrm{d}t'\end{aligned} \tag{10.4.5}$$

先对空间部分进行积分

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_{-\infty}^{t}\frac{e\boldsymbol{v}(t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_e(t')|}\delta\left[t'-t+\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_e(t')|}{c}\right]\mathrm{d}t' \tag{10.4.6}$$

利用 δ 函数的公式

$$\int f(x)\delta[\varphi(x)]\mathrm{d}x = \left.\frac{f(x)}{|\varphi'(x)|}\right|_{\varphi(x)=0} \tag{10.4.7}$$

式(10.4.6)变成

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\left.\frac{e\boldsymbol{v}(t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_e(t')|\cdot|\dot{\varphi}(t')|}\right|_{\varphi(t')=0} \tag{10.4.8}$$

其中 $\varphi(t')=t'-t+|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_e(t')|/c$. 由 $\varphi(t')=0$ 求出 t',然后代入上式,就可以得到矢量势. 令矢量 $\boldsymbol{R}(t')=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_e(t')$作运算

$$\begin{gathered}\frac{\partial \boldsymbol{R}(t')}{\partial t'}=-\frac{\partial \boldsymbol{r}_e(t')}{\partial t'}=-\boldsymbol{v}(t');\quad \boldsymbol{R}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial t'}=-\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}\\ R\frac{\partial R}{\partial t'}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t'}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{R})=\boldsymbol{R}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial t'}=-\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}\end{gathered} \tag{10.4.9}$$

因此

$$\frac{\partial R}{\partial t'}=-\frac{\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}}{R};\quad \dot{\varphi}(t')=\frac{\partial\varphi(t')}{\partial t'}=1+\frac{1}{c}\frac{\partial R}{\partial t'}=1-\frac{1}{c}\frac{\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}}{R} \tag{10.4.10}$$

代入式(10.4.8)得到

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{e\boldsymbol{v}}{R(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}/c)} \tag{10.4.11}$$

注意:上式右边的所以参量都是 t'的函数,由方程

$$t'=t-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_e(t')|}{c} \tag{10.4.12}$$

解出,而不是推迟时间. 同理可得

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{R(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}/c)} \tag{10.4.13}$$

式(10.4.11)和(10.4.13)中 $\boldsymbol{e}_R=\boldsymbol{R}/R$ 是 $\boldsymbol{R}$ 方向的单位矢量,注意:$\boldsymbol{e}_R$ 仍然是 t'的函数. 把式(10.4.11)和(10.4.13)代入 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 和方程(10.1.4)就可以得到电磁场强度. 由于计算过程涉及到微分,而 t'隐含变量 $\boldsymbol{r}$ 和 t,故首先讨论之.

1. 对时间 t 的微分

$$\frac{\partial}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t'}\frac{\partial t'}{\partial t} \tag{10.4.14}$$

而

$$\frac{\partial t'}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\left[t-\frac{R(t')}{c}\right]=1-\frac{1}{c}\frac{\partial R(t')}{\partial t}=1-\frac{1}{c}\frac{\partial R(t')}{\partial t'}\frac{\partial t'}{\partial t} \tag{10.4.15}$$

即有

$$\frac{\partial t'}{\partial t}\left[1+\frac{1}{c}\frac{\partial R(t')}{\partial t'}\right]=1 \tag{10.4.16}$$

而由方程(10.4.10)第一式

$$\frac{\partial t'}{\partial t}=\frac{1}{1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}(t')/c} \tag{10.4.17}$$

因此得到

$$\frac{\partial}{\partial t}=\frac{1}{1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}(t')/c}\frac{\partial}{\partial t'} \tag{10.4.18}$$

2. 对空间求梯度∇

$$\nabla g(\boldsymbol{r},t')=\nabla g(\boldsymbol{r},t')\,|_{t'=\text{常量}}+\frac{\partial g(\boldsymbol{r},t')}{\partial t'}\nabla t' \tag{10.4.19}$$

而

$$\begin{aligned}\nabla t'&=\nabla\left(t-\frac{R}{c}\right)=-\frac{1}{c}\nabla R=-\frac{1}{c}\left\{(\nabla R)\,|_{t'=\text{常量}}+\frac{\partial R}{\partial t'}\nabla t'\right\}\\&=-\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_R+\frac{\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}(t')}{c}\nabla t'\end{aligned}$$

故

$$\nabla t'=-\frac{1}{c}\frac{\boldsymbol{e}_R}{1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}(t')/c} \tag{10.4.20}$$

因此得到

$$\nabla=\nabla\,|_{t'=\text{常量}}-\frac{1}{c}\frac{\boldsymbol{e}_R}{1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}(t')/c}\frac{\partial}{\partial t'} \tag{10.4.21}$$

令 $K=R(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}/c)=R-\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}/c$,由方程(10.4.13)

$$\begin{aligned}\nabla\Phi(\boldsymbol{r},t)&=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0}\nabla\frac{1}{K}=-\frac{e}{4\pi\varepsilon_0K^2}\nabla K\\&=-\frac{e}{4\pi\varepsilon_0K^2}\left[\nabla\,|_{t'=\text{常量}}K-\frac{1}{c}\frac{\boldsymbol{e}_R}{1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}(t')/c}\frac{\partial K}{\partial t'}\right]\end{aligned} \tag{10.4.22}$$

而

$$\nabla\,|_{t'=\text{常量}}K=\boldsymbol{e}_R-\frac{\boldsymbol{v}}{c};\quad \frac{\partial K}{\partial t'}=-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}-\frac{\dot{\boldsymbol{v}}\cdot\boldsymbol{R}}{c}+\frac{v^2}{c} \tag{10.4.23}$$

同样

$$\begin{aligned}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}&=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0c^2}\frac{1}{1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}/c}\frac{\partial}{\partial t'}\left(\frac{\boldsymbol{v}}{K}\right)\\&=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0c^2}\frac{R}{K^2}\left[\dot{\boldsymbol{v}}+\frac{\boldsymbol{v}}{K}\left(\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{R}+\frac{\dot{\boldsymbol{v}}\cdot\boldsymbol{R}}{c}-\frac{v^2}{c}\right)\right]\end{aligned} \tag{10.4.24}$$

由式(10.4.23)和(10.4.24)得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=&\frac{e}{4\pi\varepsilon_0(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{v}/c)^3}\left\{\frac{1}{R^2}\left(\boldsymbol{e}_R-\frac{\boldsymbol{v}}{c}\right)\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)\right.\\&\left.+\frac{1}{c^2R}\boldsymbol{e}_R\times\left[\left(\boldsymbol{e}_R-\frac{\boldsymbol{v}}{c}\right)\times\dot{\boldsymbol{v}}\right]\right\}\end{aligned} \tag{10.4.25}$$

同理

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_R\times\boldsymbol{E} \tag{10.4.26}$$

注意:(10.4.25)和(10.4.26)式中物理量仍然是 t' 的函数. 由电场的表达式(10.4.25)可知,电场或磁场由两部分组成:第一部分与 R 的平方成反比,而第二部分仅与 R 成反比,其总能流与 R^2 成反比,因此是辐射场. 由于这部分与加速度有关,所以也称为**"加速度"**场.

1. 当 $v/c\ll1$,辐射场为

$$\boldsymbol{E}\approx\frac{e}{4\pi\varepsilon_0c^2R}\boldsymbol{e}_R\times(\boldsymbol{e}_R\times\dot{\boldsymbol{v}});\quad \boldsymbol{B}\approx-\frac{e}{4\pi\varepsilon_0c^3R}(\boldsymbol{e}_R\times\dot{\boldsymbol{v}}) \tag{10.4.27}$$

若取 $\boldsymbol{e}_z$ 为 $\dot{\boldsymbol{v}}$ 方向,则

$$\boldsymbol{E}\approx\frac{e\mid\dot{\boldsymbol{v}}\mid}{4\pi\varepsilon_0c^2R}\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta;\quad \boldsymbol{B}\approx-\frac{e\mid\dot{\boldsymbol{v}}\mid}{4\pi\varepsilon_0c^3R}\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi \tag{10.4.28}$$

辐射能流为

$$\boldsymbol{S}_e=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}=\frac{e^2\mid\dot{\boldsymbol{v}}\mid^2}{16\pi^2\varepsilon_0c^3R^2}\sin^2\vartheta\boldsymbol{e}_R \tag{10.4.29}$$

辐射功率为

$$P=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\mid\dot{\boldsymbol{v}}\mid^2 \tag{10.4.30}$$

注意:上式表示瞬时功率,而偶极矩辐射功率公式(10.2.24)是平均功率.

2. 当 $v/c\sim1$,辐射场为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}&=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{\beta})^3}\frac{1}{cR}\boldsymbol{e}_R\times[(\boldsymbol{e}_R-\boldsymbol{\beta})\times\dot{\boldsymbol{\beta}}]\\ \boldsymbol{B}&=\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_R\times\boldsymbol{E}\end{aligned} \tag{10.4.31}$$

其中 $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{v}/c$. 辐射能流为

$$\boldsymbol{S}_e=\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}=\varepsilon_0c\mid\boldsymbol{E}\mid^2\boldsymbol{e}_R \tag{10.4.32}$$

故在 Δt 时间间隔内穿过 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 面的能量为

$$\Delta W=\boldsymbol{S}_e\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}\Delta t=S_eR^2\mathrm{d}\Omega\Delta t \tag{10.4.33}$$

注意:上式中的能量是观察者在 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 面附近 Δt 时间间隔内观察到的. 但这些能量是带电粒子在 $\Delta t'$ 时间间隔内发出的,我们关心的是带电粒子在单位时间内辐射出去的能量,即

$$\frac{\Delta W}{\Delta t'}=S_eR^2\mathrm{d}\Omega\frac{\Delta t}{\Delta t'} \tag{10.4.34}$$

当 $v/c\ll1$ 时,电磁波传播的速度远大于粒子运动速度,基本上 $\Delta t\approx\Delta t'$,而当 $v/c\sim1$ 时,Δt 与 $\Delta t'$ 有明显的差别. 因而单位时间内沿 $\mathrm{d}\Omega$ 方向辐射出去的能

量,即角分布为

$$f(\vartheta,\varphi)=\frac{\boldsymbol{S}_e\cdot d\boldsymbol{S}\Delta t}{d\Omega\Delta t'}=\frac{\boldsymbol{S}_e\cdot d\boldsymbol{S}}{d\Omega}\frac{\partial t}{\partial t'} \tag{10.4.35a}$$

利用式(10.4.17)得到

$$\begin{aligned}f(\vartheta,\varphi)&=\frac{1}{\mu_0 c}(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{\beta})\mid\boldsymbol{E}\mid^2R^2\\&=\frac{e^2}{16\pi^2\varepsilon_0 c(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{\beta})^5}\left|\boldsymbol{e}_R\times[(\boldsymbol{e}_R-\boldsymbol{\beta})\times\dot{\boldsymbol{\beta}}]\right|^2\end{aligned} \tag{10.4.35b}$$

设 $\boldsymbol{e}_R$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的夹角为 ϑ,那么 $(1-\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{\beta})^5=(1-\beta\cos\vartheta)^5$,显然由于这项的存在,使辐射能量基本集中在 $\vartheta=0$ 附近.下面分两种情况讨论.

1. $\boldsymbol{v}\parallel\dot{\boldsymbol{v}}$,粒子作直线运动,如直线加速器中的电子,这种辐射称为**韧致辐射**.这时 $\boldsymbol{\beta}\times\dot{\boldsymbol{\beta}}=0$,因此

$$f(\vartheta,\varphi)=\frac{e^2\dot{\beta}^2}{16\pi^2\varepsilon_0 c}\frac{\sin^2\vartheta}{(1-\beta\cos\vartheta)^5} \tag{10.4.36}$$

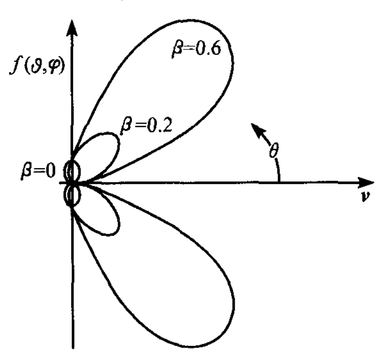


图 10.4.1　韧致辐射角分布

辐射分布如图 10.4.1.相应的辐射功率为

$$P=\int_\Omega f(\vartheta,\varphi)d\Omega=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\frac{|\dot{\boldsymbol{v}}|^2}{(1-\beta^2)^3} \tag{10.4.37}$$

2. $\boldsymbol{v}\perp\dot{\boldsymbol{v}}$,粒子作圆周运动,如回旋加速器中的电子,这种辐射称为**同步辐射**.取某一时刻 $\boldsymbol{v}$ 在 z 轴方向,$\dot{\boldsymbol{v}}$ 在 x 轴方向,那么

$$\boldsymbol{e}_R\cdot\boldsymbol{\beta}=\beta\cos\vartheta;\quad \boldsymbol{e}_R\cdot\dot{\boldsymbol{\beta}}=\dot{\beta}\sin\vartheta\cos\varphi$$

于是

$$f(\vartheta,\varphi)=\frac{e^2\dot{\beta}^2}{16\pi^2\varepsilon_0 c}\frac{(1-\beta\cos\vartheta)^2-(1-\beta^2)\sin^2\vartheta\cos^2\varphi}{(1-\beta\cos\vartheta)^5} \tag{10.4.38}$$

可见角分布不仅与极角 ϑ 有关,而且与方位角 φ 有关.限制在 $\varphi=0$ 的平面内观察,则

$$f(\vartheta,0)=\frac{e^2\dot{\beta}^2}{16\pi^2\varepsilon_0 c}\frac{(1-\beta\cos\vartheta)^2-(1-\beta^2)\sin^2\vartheta}{(1-\beta\cos\vartheta)^5} \tag{10.4.39}$$

角分布见图 10.4.2,可见能量主要集中在 $\boldsymbol{v}$ 方向.相应的辐射功率为

$$P=\int_\Omega f(\vartheta,\varphi)d\Omega=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\frac{|\dot{\boldsymbol{v}}|^2}{(1-\beta^2)^2} \tag{10.4.40}$$

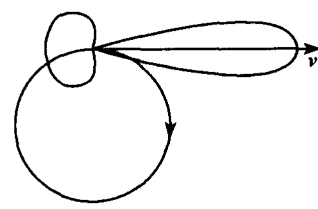


图 10.4.2　同步辐射角分布

辐射阻尼:从方程(10.4.30)、(10.4.37)和

(10.4.40)可见,带电粒子作加速运动时辐射电磁波.仅考虑 $v/c \ll 1$ 情况,由方程(10.4.30),显然粒子在单位时间内辐射出去的能量为

$$-\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}|\dot{\boldsymbol{v}}|^2 \tag{10.4.41}$$

在 $t_1 \sim t_2$ 时间间隔内辐射出去的能量为

$$\begin{aligned} W&=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}|\dot{\boldsymbol{v}}|^2\mathrm{d}t=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}\dot{\boldsymbol{v}}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{v}\\ &=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\dot{\boldsymbol{v}}\cdot\boldsymbol{v}\Big|_{t_1}^{t_2}+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}\boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}\dot{\boldsymbol{v}} \end{aligned} \tag{10.4.42}$$

设粒子作周期运动且 $t_1 \sim t_2$ 刚好为一个周期,那么粒子在一个周期内辐射出去的能量为

$$\begin{aligned} W&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}\boldsymbol{v}\cdot\mathrm{d}\dot{\boldsymbol{v}}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}\dot{\boldsymbol{v}}}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t\\ &=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}\boldsymbol{v}\cdot\ddot{\boldsymbol{v}}\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{10.4.43}$$

由于辐射,粒子损失能量和动量而作阻尼运动,相当于受到一个阻尼力 $\boldsymbol{F}_r$ 的作用,称为**辐射阻尼力**.由能量守恒定律,粒子辐射出去的能量应该等于辐射阻尼力 $\boldsymbol{F}_r$ 做的功,即

$$\int_{t_1}^{t_2}\boldsymbol{F}_r\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}t=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\int_{t_1}^{t_2}\boldsymbol{v}\cdot\ddot{\boldsymbol{v}}\mathrm{d}t \tag{10.4.44}$$

由(10.4.44)式,辐射阻尼力 $\boldsymbol{F}_r$ 为

$$\boldsymbol{F}_r=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\boldsymbol{v}} \tag{10.4.45}$$

辐射阻尼力也称为 **Lorentz 摩擦力**.显然它是由对时间取平均的方法得到的,因此不代表瞬时值,是一种时间平均效应.一般带电粒子受到的外力比辐射阻尼力大得多.

习　题　10

10.1　如果电荷分布是球对称的,证明该体系不可能辐射电磁波.(提示:证明各阶电多极矩为零)

10.2　一个电偶极矩 $\boldsymbol{p}_0$ 在 xOy 平面内以恒定的角速度 ω 绕 z 轴旋转,求辐射场分布、能流密度和角分布.(提示:旋转的电偶极矩可写成 $\boldsymbol{p}(t)=p_0(\cos\omega t\boldsymbol{e}_x+\sin\omega t\boldsymbol{e}_y)=p_0[\cos(\omega t-\varphi)\boldsymbol{e}_\rho+\sin(\omega t-\varphi)\boldsymbol{e}_\varphi])$

答案:

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0\omega^2p_0}{4\pi cr}\left\{\cos\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\cos\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi-\sin\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\boldsymbol{e}_\vartheta\right\}$$

$$E = \frac{\mu_0 \omega^2 p_0}{4\pi r}\left\{\cos\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\cos\vartheta \boldsymbol{e}_\vartheta + \sin\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\boldsymbol{e}_\varphi\right\}$$

$$f(\vartheta,\varphi) = \frac{\langle \boldsymbol{S}_e\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\mu_0 \omega^4 p_0^2}{32\pi^2 c}(1+\cos^2\vartheta).$$

10.3　一个半径为 R，通有恒定电流 I_0 的圆形线圈，绕一直径（取为 z 轴）以恒定的角速度 ω 旋转，求辐射场分布、能流密度和角分布.（提示：旋转的磁偶极矩可写成 $\boldsymbol{m}(t)=m_0(\cos\omega t \boldsymbol{e}_x+\sin\omega t \boldsymbol{e}_y)=m_0[\cos(\omega t-\varphi)\boldsymbol{e}_\rho+\sin(\omega t-\varphi)\boldsymbol{e}_\varphi]$）

答案：

$$\boldsymbol{B} = -\frac{\mu_0 \omega^2 m_0}{4\pi c^2 r}\left\{\cos\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\cos\vartheta \boldsymbol{e}_\vartheta + \sin\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\boldsymbol{e}_\varphi\right\}$$

$$\boldsymbol{E} = -\frac{\mu_0 \omega^2 p_0}{4\pi c r}\left\{\cos\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\cos\vartheta \boldsymbol{e}_\varphi - \sin\left[\omega\left(t-\frac{r}{c}\right)-\varphi\right]\boldsymbol{e}_\vartheta\right\}$$

$$f(\vartheta,\varphi) = \frac{\langle \boldsymbol{S}_e\rangle \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\mu_0 \omega^4 m_0^2}{32\pi^2 c^3}(1+\cos^2\vartheta).$$

10.4　两个相同频率和振幅的电偶极矩，相位差为 $\pi/2$，但 $\boldsymbol{p}_1$ 方向在 x 轴，$\boldsymbol{p}_2$ 方向在 xOy 平面内且与 $\boldsymbol{p}_1$ 有 ψ_0 角，求辐射的平均角分布.（提示：两个电偶极矩可表示为

$$\boldsymbol{p}_1 = p_0 \exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_x;$$

$$\boldsymbol{p}_2 = p_0 \exp[-\mathrm{i}(\omega t+\pi/2)](\cos\psi_0 \boldsymbol{e}_x + \sin\psi_0 \boldsymbol{e}_y)$$

分别求辐射场，然后相加）

答案：

$$\boldsymbol{B} = \frac{\omega^2 p_0}{4\pi\varepsilon_0 c^3 r}\{[\sin\varphi + \mathrm{i}\sin(\varphi-\psi_0)]\boldsymbol{e}_\vartheta + [\cos\varphi + \mathrm{i}\cos(\varphi-\psi_0)]\cos\vartheta \boldsymbol{e}_\varphi\}\exp[\mathrm{i}(kr-\omega t)]$$

$$f(\vartheta,\varphi) = \frac{\omega^4 p_0^2}{32\pi^2 \varepsilon_0 c^3}\{2-\sin^2\vartheta[\cos^2\varphi + \cos^2(\varphi-\psi_0)]\}.$$

10.5　两个电子沿着半径为 R 的圆轨道作恒定角速度 ω 的运动且两电子在同一直径的两端.（1）辐射的角分布和辐射场的偏振情况；（2）如果拿走一个电子则情况如何？（提示：两个电子的坐标为

$$\boldsymbol{r}_1 = R(\cos\omega t \boldsymbol{e}_x + \sin\omega t \boldsymbol{e}_y);\quad \boldsymbol{r}_2 = -R(\cos\omega t \boldsymbol{e}_x + \sin\omega t \boldsymbol{e}_y)$$

故电偶极矩 $\boldsymbol{p}$ 为零；磁偶极矩 $\boldsymbol{m}=I\boldsymbol{S}=2e\omega\pi R^2 \boldsymbol{e}_z$，$\dot{\boldsymbol{m}}=0$，故必须考虑电四极矩辐射

$$\boldsymbol{D} = R^2 e[(1+3\cos 2\omega t)\boldsymbol{e}_x \boldsymbol{e}_x + (1-3\cos 2\omega t)\boldsymbol{e}_y \boldsymbol{e}_y - 2\boldsymbol{e}_z \boldsymbol{e}_z + 3\sin 2\omega t(\boldsymbol{e}_x \boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_x \boldsymbol{e}_y)]$$）

答案：（1）$f(\vartheta,\varphi) = \dfrac{\mu_0 R^4 e^2 \omega^6}{2\pi^2 c^3}\sin^2\vartheta(1+\cos^2\vartheta)$，$\vartheta=0$ 和 π 时为圆偏振，$\vartheta=\pi/2$

为线偏振，一般为椭圆偏振；(2) 只有一个电子时，仅需要考虑电偶极矩辐射 $\boldsymbol{p}=eR(\cos\omega t\boldsymbol{e}_x+\sin\omega t\boldsymbol{e}_y)$，结果与习题 10.2 类似. 本题也可先求一个电子的场然后相加.

10.6　半径为 R 的均匀磁铁，磁化强度为 $\boldsymbol{M}_0$，以恒定角速度 ω 绕过球心且垂直于 $\boldsymbol{M}_0$ 的轴旋转($R\omega\ll c$)，求辐射场和能流密度.（提示：设绕 z 轴旋转，则 $\boldsymbol{M}_0$ 在 xOy 平面转动，该转动可分解成 x 和 y 方向的两个线振动

$$\boldsymbol{m}=\frac{4}{3}\pi R^3M_0(\cos\omega t\boldsymbol{e}_x+\sin\omega t\boldsymbol{e}_y)$$

故结果与题 10.3 类似）

答案：$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\dfrac{\mu_0\omega^4R^6M_0^2}{18c^3r^2}(1+\cos^2\vartheta)\boldsymbol{e}_r$.

10.7　一个磁偶极矩 $\boldsymbol{m}$ 绕一轴以恒定的角速度 ω 旋转，$\boldsymbol{m}$ 与旋转轴夹角为 α，求辐射功率；地球的磁矩 $m=8.0\times10^{22}\,\mathrm{A\cdot m^2}$，与自转轴夹角为 $\alpha=11°$，如果转动能量由于磁极矩辐射而减少，并导致一天长度变化，估计变化率.（提示：磁偶极矩分解为

$$\boldsymbol{m}(t)=m\cos\alpha\boldsymbol{e}_z+m(\cos\omega t\boldsymbol{e}_x+\sin\omega t\boldsymbol{e}_y)$$

地球转动惯量为 $I=8.1\times10^{37}\,\mathrm{kg\cdot m^2}$，转动能量为 $E=I\omega^2/2$，能量变化率等于辐射功率 $P=-\mathrm{d}E/\mathrm{d}t$）

答案：辐射功率

$$P=\frac{\mu_0\omega^4m^2}{6\pi c^3}\sin^2\alpha$$

转动周期变化率

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t}=\frac{T^3P}{4\pi^2I}=2.8\times10^{-25}\,\mathrm{s/d}.$$

10.8　围绕质子作圆周运动的电子，开始的轨道半径为

$$a_0=4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m_ee^2)=0.529\times10^{-10}\,\mathrm{m}$$

电子由于辐射能量，轨道半径越来越小.(1) 求电子与原子核相接触的时间；(2) 在此时间内电子辐射的能量.（提示：电子的总能量为

$$E=T+V=\frac{1}{2}mv^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0R}=-\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0R}$$

能量变化

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}R}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t}=\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0R^2}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t}=-P=-\frac{e^2a^2}{6\pi\varepsilon_0c^3}）$$

答案：(1) $T\approx3.2\times10^{-13}\,\mathrm{s}$；(2) $E_t=e^2/(8\pi\varepsilon_0a_0)$. 本题说明经典的原子是不稳定的.

10.9　一个电偶极矩振幅为 p_0，以频率 ω 振荡. 它与一无限大理想导体平面

平行且相距 $a/2$，求辐射场和平均角分布.（提示：建立直角坐标系，以导体法向为 x 轴方向，电偶极矩位于 x 轴上，方向为 z 轴方向，用镜像法，像偶极矩在 $(-a/2,0,0)$ 处，偶极矩为

$$\boldsymbol{p}'=-p_0\exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_z$$

分别求两个偶极矩的场分布，然后相加. 注意：电偶极矩和像电偶极矩到观察点的距离可近似为

$$r_1\approx r-\boldsymbol{e}_r\cdot\frac{a}{2}\boldsymbol{e}_x=r-\frac{a}{2}\sin\vartheta\cos\varphi$$

$$r_2\approx r+\boldsymbol{e}_r\cdot\frac{a}{2}\boldsymbol{e}_x=r+\frac{a}{2}\sin\vartheta\cos\varphi)$$

答案：

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mathrm{i}\omega^2p_0}{2\pi\varepsilon_0c^3r}\sin\vartheta\sin\left(\frac{k}{2}a\sin\vartheta\cos\varphi\right)\boldsymbol{e}_\varphi\exp[\mathrm{i}(kr-\omega t)]$$

$$\boldsymbol{E}=\frac{\mathrm{i}\omega^2p_0}{2\pi\varepsilon_0c^2r}\sin\vartheta\sin\left(\frac{k}{2}a\sin\vartheta\cos\varphi\right)\boldsymbol{e}_\vartheta\exp[\mathrm{i}(kr-\omega t)].$$

10.10 一个电偶极矩振幅为 p_0，以角频率 ω 振荡. 它与一无限大理想导体平面垂直且相距 $a/2$，求辐射场和平均角分布.（提示：建立直角坐标系，以导体法向为 z 轴方向，电偶极矩位于 z 轴上，方向为 z 轴方向，用镜像法，像偶极矩在 $(0,0,-a/2)$ 处，偶极矩为

$$\boldsymbol{p}'=-p_0\exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_z$$

分别求两个偶极矩的场分布，然后相加. 注意：电偶极矩和像电偶极矩到观察点的距离可近似为

$$r_1\approx r-\frac{a}{2}\cos\vartheta;\quad r_2\approx r+\frac{a}{2}\cos\vartheta)$$

答案：

$$\boldsymbol{B}=\frac{\mathrm{i}\omega^2p_0}{2\pi\varepsilon_0c^3r}\sin\vartheta\sin\left(\frac{k}{2}a\sin\vartheta\right)\boldsymbol{e}_\varphi\exp[\mathrm{i}(kr-\omega t)]$$

$$\boldsymbol{E}=\frac{\mathrm{i}\omega^2p_0}{2\pi\varepsilon_0c^2r}\sin\vartheta\sin\left(\frac{k}{2}a\sin\vartheta\right)\boldsymbol{e}_\vartheta\exp[\mathrm{i}(kr-\omega t)].$$

第 11 章　运动体系的电磁场和波

以上几章介绍了经典电磁学的基本理论. 对电磁波方程中出现的常数,即光速 $c=1/\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ 并没有过多的关心. 现在的问题是:这个普适常数是针对哪个坐标系的? 我们知道声速是相对于介质静止的坐标系的声传播速度,这里存在介质是关键. 那么是否也存在一种介质,在相对于这个介质静止的坐标系内,电磁波的速度是光速? 在相对于这个介质运动的坐标系内,电磁波又如何传播? 实验证明,这样的介质是不存在的,而且在一切惯性参考系内,光速 c 是一个不变的常数.

11.1　Lorentz 变换和 Minkowski 空间

物理世界的规律是通过时间和空间坐标来描述的,而物理规律本身应当与坐标系的选择无关. 也就是说在不同的坐标系中,物理规律表述的形式始终保持不变,这是一个重要的基本假定,称为**相对性原理**.

我们首先来看力学的相对性原理. 由第 1 章,牛顿力学在惯性参考系内成立,不同的惯性参考系由 Galileo 变换联系. 假定惯性参考系 S' 相对于另一个惯性参考系 S 在 x 方向以 v 匀速运动,且假定时间为零时,二个参考系的坐标原点重合,那么坐标变换为

$$x' = x - vt;\quad y' = y;\quad z' = z;\quad t' = t \tag{11.1.1}$$

其中 t 和 t' 分别表示两个参考系内观察事件 P 发生的时刻. 上式表明:时间 t 是绝对的,与坐标系的运动无关;空间也是绝对的,即两点之间的间隔 $(x_2'-x_1')=(x_2-x_1)$ 与坐标系的运动无关. 由于牛顿第二定律是关于时间的二阶导数,在 S 系内,如果 $\boldsymbol{F}=m\ddot{\boldsymbol{r}}$,那么在 S' 系内必定有 $\boldsymbol{F}'=m\ddot{\boldsymbol{r}}'$. 因此牛顿方程在 Galileo 变换(11.1.1)下保持形式不变.

但是,经典电磁学的 Maxwell 方程组在 Galileo 变换下是否也保持不变? 看一个简单的例子:如果在 S 内

$$\nabla\times\boldsymbol{E} = -\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{11.1.2}$$

那么在 S' 内

$$\nabla'\times\boldsymbol{E} = -\left(\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t'}\frac{\partial t'}{\partial t}+\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial x'}\frac{\partial x'}{\partial t}\right) = -\left(\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t'}-v\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial x'}\right)\neq-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t'}$$

显然在两个坐标系内,Maxwell 方程组的形式不同. Galileo 变换对电磁波传播规

律的描述是不正确的！Michelson-Morley 实验表明：在不同惯性参考系中测量得到的光速为常数 c，而由 Galileo 变换是不可能得到这样的结论的. 因此必须寻找新的坐标变换，在新的坐标变换下，力学和电磁学规律具有不变性. 下面介绍这个新的变换，称为 **Lorentz 变换**.

Einstein 假定：①相对性原理，即所有的自然规律在一切惯性参考系中有相同的形式. 这里的自然规律包括力学、电磁学等规律；②光速不变原理，即在一切惯性参考系中测量到的真空中光速为 c.

Lorentz 变换：假定惯性参考系 S' 相对于另一个惯性参考系 S 在 x 方向以 v 匀速运动且时间为零时，两个参考系的坐标原点重合. 在 $t=t'=0$ 时，在坐标原点发出一个闪光，经过一段时间后，在两个坐标系测量到光信号的空-时坐标分别为 (x,y,z,t) 和 (x',y',z',t'). 根据光速不变原理，S 和 S' 系中闪光的传播速度都为 c，于是

$$(x^2+y^2+z^2)-c^2t^2=0 \tag{11.1.3}$$

$$(x'^2+y'^2+z'^2)-c^2t'^2=0 \tag{11.1.4}$$

发出闪光与接收到闪光可看作两个发生的事件，于是定义两事件的空-时间隔为

$$s=\sqrt{x^2+y^2+z^2-c^2t^2};\quad s'=\sqrt{x'^2+y'^2+z'^2-c^2t'^2} \tag{11.1.5}$$

当两个事件用电磁信号联系时 $s=s'=0$，否则不为零.

由于 S 和 S' 都是惯性参考系，假定时空是均匀和各向同性的，一个事件在两个坐标系中的变换应是线性变换，并且两个惯性系相互变换是等价的，于是在不同惯性参考系内，两个事件发生的空-时间隔 s 和 s' 应相等或至多差一个常数. 因此由光速不变原理，可以令 $s=s'$，即

$$(x'^2+y'^2+z'^2)-c^2t'^2=(x^2+y^2+z^2)-c^2t^2 \tag{11.1.6}$$

上式称为**空-时间隔不变**，它是光速不变原理的数学表达式. 设 S 和 S' 系变换的一般关系为

$$x'=a_{11}x+a_{14}(ct);\quad y'=y;\quad z'=z;\quad ct'=a_{41}x+a_{44}(ct) \tag{11.1.7}$$

代入式(11.1.6)得到

$$a_{11}^2-a_{41}^2=1;\quad a_{11}a_{14}-a_{41}a_{44}=0;\quad a_{14}^2-a_{44}^2=-1 \tag{11.1.8}$$

由于在 $t=0$ 时原点 O 与 O' 重合，经过 t 时间后 S' 的原点 O' 在 S 系看来在 $x=vt$ 处：将 $x'=0$，$x=vt$ 代入方程(11.1.7)第一式得到

$$0=a_{11}v+a_{14}(c) \tag{11.1.9}$$

解方程(11.1.8)和(11.1.9)得到

$$a_{11}=a_{44}=\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}};\quad a_{14}=a_{41}=\frac{-v/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \tag{11.1.10}$$

因此由方程(11.1.6)得到坐标变换为

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad y' = y;\quad z' = z;\quad t' = \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.11}$$

其中 $\beta = v/c$. (11.1.11)式称为 **Lorentz 变换**. 显然逆变换为

$$x = \frac{x' + vt'}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad y' = y;\quad z' = z;\quad t = \frac{t' + vx'/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.12}$$

当 $\beta = v/c \ll 1$ 时,Lorentz 变换退化为 Galileo 变换.

从 Lorentz 变换可以得出时间膨胀和长度收缩二个重要结论.

1. **时间膨胀**:设有一个时钟在 S' 内静止,在 S' 的同一地点从 t_1' 到 t_2' 发生两个事件,那么事件发生的时间间隔为 $\Delta\tau = t_2' - t_1'$,称时钟相对静止的坐标测量的时间间隔为**固有时间间隔**. 在 S 系看来时间间隔是多少呢? 利用 Lorentz 变换(11.1.11),发生第一、二个事件的时间分别为

$$t_1 = \frac{t_1' + vx'/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad t_2 = \frac{t_2' + vx'/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.13}$$

故时间间隔为

$$\Delta t = t_1 - t_2 = \frac{t_1' - t_2'}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{\Delta\tau}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.14}$$

所以在相对运动的坐标系测量到的时间间隔变长了,称为**时间膨胀**.

2. **长度收缩**:设在 S' 内静止的尺子,两端的坐标分别为 x_1' 和 x_2',那么它的长度为 $l_0 = x_2' - x_1'$,称尺子相对静止的坐标测量的长度为**固有长度**. 在 S 系看来尺子的长度应该是多少呢? 在 S 系看来尺子两端的坐标分别为 x_2 和 x_1,由 Lorentz 变换(11.1.11)

$$x_2' = \frac{x_2 - vt_2}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad x_1' = \frac{x_1 - vt_1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.15}$$

因此

$$x_2' - x_1' = \frac{(x_2 - x_1) - v(t_2 - t_1)}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.16}$$

而在 S 系测量尺子的长度必须同时测量两端的坐标,即 $t_2 - t_1 = 0$,故

$$l = x_2 - x_1 = l_0\sqrt{1-\beta^2} \tag{11.1.17}$$

所以在相对运动的坐标系测量的尺子长度变短了,称为**长度收缩**.

从 Lorentz 坐标变换可以得到速度变换的公式. 由式(11.1.11)

$$\mathrm{d}x' = \frac{\mathrm{d}x - v\mathrm{d}t}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad \mathrm{d}y' = \mathrm{d}y;\quad \mathrm{d}z' = \mathrm{d}z;\quad \mathrm{d}t' = \frac{\mathrm{d}t - v\mathrm{d}x/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.1.18}$$

而

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{dx'}{dt}\frac{dt'}{dt} \tag{11.1.19}$$

对 u'_y 和 u'_z 可得到类似的表示式. 由式(11.1.18)得到

$$u'_x = \frac{u_x - v}{1 - \frac{v}{c^2}u_x}; \quad u'_y = \frac{u_y\sqrt{1-\beta^2}}{1 - \frac{v}{c^2}u_x}; \quad u'_z = \frac{u_z\sqrt{1-\beta^2}}{1 - \frac{v}{c^2}u_x} \tag{11.1.20}$$

Minkowski 空间:引入虚数 $x_4 = \mathrm{i}ct$,并用 x_1,x_2 和 x_3 代替 x,y 和 z,那么空-时间隔可表示成

$$s^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = \sum_{\sigma=1}^{4} x_\sigma x_\sigma \equiv x_\sigma x_\sigma \tag{11.1.21}$$

这样我们就可以引进一个虚构的四维空间,称为 Minkowski 空间,其坐标轴为

$$x_\sigma = (x_1, x_2, x_3, x_4) \tag{11.1.22}$$

四维空间的长度(或称范数)为 s.

另一方面,Lorentz 变换(11.1.11)可写成矩阵的形式

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \\ x'_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & \mathrm{i}\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\mathrm{i}\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \equiv \mathbf{A} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \tag{11.1.23}$$

或者写成分量的形式

$$x'_\sigma = \sum_{\nu=1}^{4} a_{\sigma\nu} x_\nu \equiv a_{\sigma\nu} x_\nu \quad (\sigma, \nu = 1,2,3,4) \tag{11.1.24}$$

其中 $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$. 把 $x_\sigma = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ 和 $x'_\sigma = (x'_1, x'_2, x'_3, x'_4)$ 看成两个不同的 Minkowski 空间,显然 $\mathbf{A}$ 就是这两个 Minkowski 空间的线性变换. 因为

$$s'^2 = \sum_{\sigma=1}^{4} x'_\sigma x'_\sigma \equiv a_{\alpha\nu} a_{\alpha\sigma} x_\nu x_\sigma = x_\alpha x_\alpha = s^2 \tag{11.1.25}$$

故 $\mathbf{A}$ 是一个正交变换. 在正交变换下,不同的物理量有不同的变换关系,根据不同的关系,把物理量区分为标量、矢量、二阶张量,等等.

1. 标量:在正交变换下不变的量,如上式中的四维长度 s;

2. 矢量:设在空间 x_σ 有 4 个数 $p_\sigma = (p_1, p_2, p_3, p_4)$,通过正交变换 $a_{\sigma\nu}$ 后,在 x'_σ 空间变成 p'_σ 且有关系

$$p'_\sigma = a_{\sigma\nu} p_\nu \quad (\sigma = 1,2,3,4) \tag{11.1.26}$$

那么称 p_σ 为**矢量**;

3. 二阶张量:设在空间 x_σ 有 $4^2 = 16$ 个数 $p_{\sigma\nu}$,通过正交变换 $a_{\sigma\nu}$ 后,在 x'_σ 空间变成 $p'_{\sigma\nu}$ 且有关系

$$p'_{\sigma\nu} = a_{\sigma\alpha} a_{\nu\tau} p_{\alpha\tau} \quad (\sigma, \nu = 1,2,3,4) \tag{11.1.27}$$

那么称 $p_{\sigma\nu}$ 为**二阶张量**；

4. n 阶张量：设在空间 x_σ 有 4^n 个数 $p_{\sigma\nu\cdots\lambda}$，通过正交变换 $a_{\sigma\nu}$ 后，在 x'_σ 空间变成 $p'_{\sigma\nu\cdots\lambda}$ 且有关系

$$p'_{\sigma\nu\cdots\lambda} = a_{\sigma\alpha}a_{\nu\tau}\cdots a_{\lambda\gamma}p_{\alpha\tau\cdots\gamma} \quad (\sigma,\nu,\cdots,\lambda = 1,2,3,4) \tag{11.1.28}$$

那么称 $p_{\sigma\nu\cdots\lambda}$ 为 n 阶张量. 显然 0 阶张量为标量，1 阶张量为矢量.

任何物理规律都是由物理量构成的一些等式. 相对性原理要求物理规律在任何一个惯性参考系都相同. 这意味着：在坐标变换下，表示物理规律的等式的形式应保持不变. 如果等式两边的物理量是由同阶的张量构成，那么这种形式的方程一定满足相对性原理，称这种形式的方程为**协变式**. 如某一物理规律为 $A_\sigma = B_\sigma$，其中 A_σ、B_σ 是 S 系中的不同物理量. 由于 A_σ、B_σ 是一阶张量：$A'_\sigma = a_{\sigma\nu}A_\nu$ 和 $B'_\sigma = a_{\sigma\nu}B_\nu$，于是

$$A'_\sigma = a_{\sigma\nu}A_\nu = a_{\sigma\nu}B_\nu = B'_\sigma \tag{11.1.29}$$

即在 S' 系中也有形式 $A'_\sigma = B'_\sigma$. 因此，判断一个物理规律是否满足相对性原理，只要看其物理方程是否协变.

例 11.1.1　证明下列关系：

1. 坐标的一阶偏导数相当于一阶张量；
2. 两个四维矢量的标量积为不变量；
3. 一个四维矢量的四维散度为一不变量；
4. 四维波动算符为不变量.

解： 1. 因为

$$\frac{\partial}{\partial x'_\sigma} = \frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\sigma} = a_{\sigma\nu}\frac{\partial}{\partial x_\nu} \tag{11.1.30}$$

由矢量的定义式(11.1.26)，$\partial/\partial x_\nu$ 相当于一阶张量；

2. 两个四维矢量 A_σ 和 B_σ 的标量积为

$$A_\sigma B_\sigma = A_1B_1 + A_2B_2 + A_3B_3 + A_4B_4 \tag{11.1.31}$$

在坐标变换下

$$A'_\sigma B'_\sigma = a_{\sigma\nu}A_\nu a_{\sigma\beta}B_\beta = a_{\sigma\nu}a_{\sigma\beta}A_\nu B_\beta = \delta_{\nu\beta}A_\nu B_\beta = A_\beta B_\beta \tag{11.1.32}$$

故 $A_\sigma B_\sigma$ 是坐标不变量；

3. 四维矢量 A_σ 的散度为

$$\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\sigma} = \frac{\partial A_1}{\partial x_1} + \frac{\partial A_2}{\partial x_2} + \frac{\partial A_3}{\partial x_3} + \frac{\partial A_4}{\partial x_4} \tag{11.1.33}$$

在坐标变换下

$$\begin{aligned}\frac{\partial A'_\sigma}{\partial x'_\sigma} &= \frac{\partial A'_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\sigma} = a_{\sigma\nu}\frac{\partial A'_\sigma}{\partial x_\nu}\\ &= a_{\sigma\nu}a_{\sigma\beta}\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\nu} = \delta_{\nu\beta}\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\nu} = \frac{\partial A_\beta}{\partial x_\beta}\end{aligned} \tag{11.1.34}$$

故结论得证;

4. 四维波动算符为

$$\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}=\frac{\partial}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x_2}+\frac{\partial}{\partial x_3}\frac{\partial}{\partial x_3}+\frac{\partial}{\partial x_4}\frac{\partial}{\partial x_4} \tag{11.1.35}$$

在坐标变换下

$$\frac{\partial}{\partial x'_\sigma}\frac{\partial}{\partial x'_\sigma}=a_{\sigma\nu}a_{\sigma\beta}\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial}{\partial x_\beta}=\delta_{\nu\beta}\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial}{\partial x_\beta}=\frac{\partial}{\partial x_\beta}\frac{\partial}{\partial x_\beta} \tag{11.1.36}$$

因此四维波动算符为不变量.

11.2　Maxwell 方程组的协变形式和场的 Hamilton 函数

下面写出 Maxwell 方程组的协变形式.

四维电流密度:电荷-电流连续性方程为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \tag{11.2.1}$$

上式改写成

$$\frac{\partial j_1}{\partial x_1}+\frac{\partial j_2}{\partial x_2}+\frac{\partial j_3}{\partial x_3}+\frac{\partial j_4}{\partial x_4}=0 \tag{11.2.2}$$

其中 $j_4=\mathrm{i}c\rho$. 因此如果引入四维电流密度 $j_\sigma=(j_1,j_2,j_3,j_4)=(\boldsymbol{j},j_4)$,则上式可写成形式

$$\frac{\partial j_\sigma}{\partial x_\sigma}=0 \tag{11.2.3}$$

可以证明 j_σ 确实是一个四维矢量,因此由式(11.1.34),上式是协变的. 因 j_σ 是四维矢量,即 $j'_\sigma=a_{\sigma\nu}j_\nu$. 用 $a_{\sigma\nu}$ 的矩阵形式展开后可得到电流和电荷密度的变换关系

$$j'_1=\gamma(j_1-\rho v);\quad j'_2=j_2;\quad j'_3=j_3;\quad \rho'=\gamma\left(\rho-\frac{v}{c^2}j_1\right) \tag{11.2.4}$$

四维势和波动方程:矢量势和标量势满足波动方程

$$\nabla^2\boldsymbol{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=-\mu_0\boldsymbol{j};\quad \nabla^2\Phi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}=-\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{11.2.5}$$

以及 Lorentz 规范

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi}{\partial t}=0 \tag{11.2.6}$$

定义四维矢量

$$A_\sigma=\left(\boldsymbol{A},\mathrm{i}\frac{\Phi}{c}\right) \tag{11.2.7}$$

那么方程(11.2.5)可合写成协变形式

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}=-\mu_0 j_\sigma \quad (\sigma=1,2,3,4) \tag{11.2.8}$$

Lorentz 规范式(11.2.6)也可写协变形式

$$\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\sigma}=0 \tag{11.2.9}$$

显然,由式(11.1.34)和(11.1.36),(11.2.8)和(11.2.9)两个方程是协变的.

Maxwell 方程组:电磁场强度

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A};\quad \boldsymbol{E}=-\nabla\Phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{11.2.10}$$

不是四维矢量,但是利用四维势 $A_\sigma=(\boldsymbol{A},\mathrm{i}\Phi/c)$,第一个分量形式为

$$B_1=\frac{\partial A_3}{\partial x_2}-\frac{\partial A_2}{\partial x_3};\quad E_1=-\frac{\partial\Phi}{\partial x_1}-\frac{\partial A_1}{\partial t} \tag{11.2.11}$$

第二式可写成

$$\frac{\mathrm{i}}{c}E_1=-\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{\mathrm{i}}{c}\Phi\right)+\frac{\partial A_1}{\partial(\mathrm{i}ct)}=-\frac{\partial A_4}{\partial x_1}+\frac{\partial A_1}{\partial x_4} \tag{11.2.12}$$

同样可用四维势写出第二和第三个分量.受(11.2.12)式的启发,可以用 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的各个分量构成一个二阶反对称张量

$$F_{\sigma\nu}\equiv-\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}+\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\sigma}=-F_{\nu\sigma} \tag{11.2.13}$$

显然 $F_{23}=B_1$,$F_{41}=\mathrm{i}E_1/c$. $F_{\mu\nu}$ 的矩阵形式为

$$F_{\sigma\nu}=\begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 & -\mathrm{i}E_1/c \\ -B_3 & 0 & B_1 & -\mathrm{i}E_2/c \\ B_2 & -B_1 & 0 & -\mathrm{i}E_3/c \\ \mathrm{i}E_1/c & \mathrm{i}E_2/c & \mathrm{i}E_3/c & 0 \end{pmatrix} \tag{11.2.14}$$

可见 $\boldsymbol{E}=c(F_{41},F_{42},F_{43})/\mathrm{i}$ 和 $\boldsymbol{B}=(F_{23},F_{31},F_{12})$. 于是两个 Maxwell 方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\rho/\varepsilon_0;\quad \nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\left(\boldsymbol{j}+\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right) \tag{11.2.15}$$

可统一写成协变形式

$$\frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\nu}=\mu_0 j_\sigma \quad (\sigma=1,2,3,4) \tag{11.2.16}$$

而另外两个 Maxwell 方程

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0;\quad \nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{11.2.17}$$

可统一写成协变形式

$$\frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\lambda}+\frac{\partial F_{\nu\lambda}}{\partial x_\sigma}+\frac{\partial F_{\lambda\sigma}}{\partial x_\nu}=0 \tag{11.2.18}$$

方程(11.2.16)和(11.2.18)即为协变形式的 Maxwell 方程组.

电磁场的能量和动量也可以写成协变的形式.

1. Lorentz 力密度

$$\boldsymbol{f} = \rho \boldsymbol{E} + \boldsymbol{j} \times \boldsymbol{B} \tag{11.2.19}$$

上式左边是一个三维矢量,右边 ρ 和 $\boldsymbol{j}$ 构成四维矢量 $j_\sigma = (\boldsymbol{j}, j_4)$,而 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 构成电磁张量. 张量与矢量的点积为矢量,故可能的途径为

$$f_\sigma = F_{\sigma\nu} j_\nu \tag{11.2.20}$$

不难证明 $\boldsymbol{f} = (f_1, f_2, f_3)$,而四维矢量的第四个分量为

$$f_4 = F_{41} j_1 + F_{42} j_2 + F_{43} j_3 + F_{44} j_4 = \frac{\mathrm{i}}{c} \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{E} \tag{11.2.21}$$

可见 f_4 与功率密度相联系.

2. 能量-动量张量

由方程(11.2.20)和(11.2.16)

$$f_\sigma = F_{\sigma\nu} j_\nu = \frac{1}{\mu_0} F_{\sigma\nu} \frac{\partial F_{\nu\lambda}}{\partial x_\lambda} = \frac{1}{\mu_0} \left[\frac{\partial}{\partial x_\lambda} (F_{\sigma\nu} F_{\nu\lambda}) - F_{\nu\lambda} \frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\lambda} \right] \tag{11.2.22}$$

第二项求和指标交换

$$\begin{aligned} F_{\nu\lambda} \frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\lambda} &= F_{\lambda\nu} \frac{\partial F_{\sigma\lambda}}{\partial x_\nu} = \frac{1}{2} \left(F_{\nu\lambda} \frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\lambda} + F_{\lambda\nu} \frac{\partial F_{\sigma\lambda}}{\partial x_\nu} \right) \\ &= \frac{1}{2} F_{\nu\lambda} \left(\frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\lambda} + \frac{\partial F_{\lambda\sigma}}{\partial x_\nu} \right) \end{aligned} \tag{11.2.23}$$

其中已经利用式(11.2.13),即电磁张量的反对称性:$F_{\sigma\nu} = -F_{\nu\sigma}$. 进一步利用方程(11.2.18),上式可写成

$$\begin{aligned} F_{\nu\lambda} \frac{\partial F_{\sigma\nu}}{\partial x_\lambda} &= -\frac{1}{2} F_{\nu\lambda} \frac{\partial F_{\nu\lambda}}{\partial x_\sigma} = -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial x_\sigma} (F_{\nu\lambda} F_{\nu\lambda}) \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial x_\sigma} (F_{\nu\tau} F_{\nu\tau}) \end{aligned} \tag{11.2.24}$$

代入式(11.2.22)得到

$$\begin{aligned} f_\sigma &= \frac{1}{\mu_0} \left[\frac{\partial}{\partial x_\lambda} (F_{\sigma\nu} F_{\nu\lambda}) + \frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial x_\sigma} (F_{\nu\tau} F_{\nu\tau}) \right] \\ &= \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial}{\partial x_\lambda} \left[F_{\sigma\nu} F_{\nu\lambda} + \frac{1}{4} F_{\nu\tau} F_{\nu\tau} \delta_{\sigma\lambda} \right] \end{aligned} \tag{11.2.25}$$

定义张量

$$G_{\sigma\lambda} = F_{\sigma\nu} F_{\nu\lambda} + \frac{1}{4} F_{\nu\tau} F_{\nu\tau} \delta_{\sigma\lambda} \tag{11.2.26}$$

则四维力密度可写成

$$f_\sigma = \frac{1}{\mu_0}\frac{\partial G_{\sigma\lambda}}{\partial x_\lambda} \quad (\sigma = 1,2,3,4) \tag{11.2.27}$$

把 $F_{\sigma\lambda}$ 的表达式(11.2.14)代入(11.2.26)得到 $G_{\sigma\lambda}$ 的矩阵形式为

$$[G_{\sigma\lambda}] = \begin{bmatrix} -T_{11} & -T_{12} & -T_{13} & -icg_1 \\ -T_{21} & -T_{22} & -T_{23} & -icg_2 \\ -T_{31} & -T_{32} & -T_{33} & -icg_3 \\ -\frac{i}{c}S_1 & -\frac{i}{c}S_2 & -\frac{i}{c}S_3 & w \end{bmatrix} \tag{11.2.28}$$

其中 $T_{ik}(i,k=1,2,3)$是 Maxwell 应力张量 $\boldsymbol{T}$ 的九个分量；$S_i(i=1,2,3)$是能量流矢量 $\boldsymbol{S}_e$ 的三个分量；$g_i(i=1,2,3)$是动量流密度矢量 $\boldsymbol{g}$ 的三个分量；w 是能量密度，它们分别由式(7.4.16)、(7.4.6)、(7.4.19)和(7.4.9)表示.

不难验证，当 $\sigma=1,2,3$ 时，方程(11.2.27)给出动量守恒方程的微分形式

$$\nabla \cdot \boldsymbol{T} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{S}_e}{\partial t} = -\boldsymbol{f} \tag{11.2.29}$$

而当 $\sigma=4$ 时给出能量守恒方程(7.4.10)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{S}_e + \frac{\partial w}{\partial t} = -\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{j} \tag{11.2.30}$$

故 $G_{\sigma\lambda}$ 称为**能量-动量张量**.

电磁场的 Lagrange 函数和 Hamilton 函数：为了把 Hamilton 力学的最小作用量原理推广到电磁场问题，定义 Lagrange 密度函数

$$\ell = \ell\left(A_\sigma, \frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\right) \tag{11.2.31}$$

注意：上式中 σ,ν 都可从 1 变到 4，A_σ 相当于广义坐标. Lagrange 密度函数构成的原则是从 Hamilton 原理

$$\delta S = \delta\int \ell \mathrm{d}^4 x = \delta\int \ell\left(A_\sigma, \frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\right)\mathrm{d}^4 x = 0 \tag{11.2.32}$$

可以导出电磁场方程(11.2.8). 式中 $\mathrm{d}^4x = \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3\mathrm{d}x_4$. 因为 ℓ 是标量，A_σ 和 j_σ 是四维矢量，由四维矢量 A_σ 和 j_σ 构成标量 ℓ 的简单方法是取

$$\begin{aligned} \ell &= -\frac{1}{2\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu} + A_\sigma j_\sigma \\ &= -\frac{1}{2\mu_0}\sum_{\sigma,\nu=1}^{4}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu} + \sum_{\sigma=1}^{4} A_\sigma j_\sigma \end{aligned} \tag{11.2.33}$$

代入方程(11.2.32)

$$\delta\int \ell \mathrm{d}^4 x = \delta\int\left(-\frac{1}{2\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu} + A_\sigma j_\sigma\right)\mathrm{d}^4 x = 0 \tag{11.2.34}$$

显然

$$\int\left(-\frac{1}{2\mu_0}2\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\delta\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}+\delta A_\sigma j_\sigma\right)\mathrm{d}^4x=0 \tag{11.2.35}$$

首先讨论第一项积分

$$\int\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial\delta A_\sigma}{\partial x_\nu}\mathrm{d}^4x=\int\left[\frac{\partial}{\partial x_\nu}\left(\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\delta A_\sigma\right)-\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\right)\delta A_\sigma\right]\mathrm{d}^4x \tag{11.2.36}$$

上式第一项化体积分为面积分得到

$$\begin{aligned}\int\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial\delta A_\sigma}{\partial x_\nu}\mathrm{d}^4x&=\int\left[\frac{\partial}{\partial x_\nu}\left(\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\delta A_\sigma\right)-\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\right)\delta A_\sigma\right]\mathrm{d}^4x\\&=\iint_S\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\delta A_\sigma\mathrm{d}S-\int\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\right)\delta A_\sigma\mathrm{d}^4x\\&=\int\left(-\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\right)\delta A_\sigma\mathrm{d}^4x\end{aligned} \tag{11.2.37}$$

其中 $\mathrm{d}S$ 可看成是四维空间中超曲面的面积元，S 为区域的边界面. 在边界面上，场应该作为边界条件给出，故 $\delta A_\sigma|_S=0$. 把式(11.2.37)代入式(11.2.35)得到

$$\int\left(-\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}+j_\sigma\right)\delta A_\sigma\mathrm{d}^4x=0 \tag{11.2.38}$$

由变分的任意性，得到

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}=-\mu_0 j_\sigma\quad(\sigma=1,2,3,4) \tag{11.2.39}$$

与方程(11.2.8)一致，故 Lagrange 密度选择式(11.2.33)是正确的.

与 Hamilton 力学中类似，定义电磁场的正则动量(注意 $x_4=\mathrm{i}ct$)

$$\pi_\sigma=\frac{\partial\ell}{\partial\dot{A}_\sigma}=\frac{1}{\mathrm{i}c}\frac{\partial\ell}{\partial\left(\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_4}\right)}=\frac{1}{\mathrm{i}c}\left(-\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_4}\right) \tag{11.2.40}$$

故 Hamilton 函数密度为

$$\begin{aligned}h&=\pi_\sigma\dot{A}_\sigma-\ell=-\left(\frac{1}{\mathrm{i}c\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_4}\right)\left(\mathrm{i}c\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_4}\right)\\&\quad+\frac{1}{2\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}-A_\sigma j_\sigma=-\frac{1}{\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_4}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_4}\\&\quad+\frac{1}{2\mu_0}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}\frac{\partial A_\sigma}{\partial x_\nu}-A_\sigma j_\sigma\end{aligned} \tag{11.2.41}$$

可以证明：在三维空间中，电磁体系的 Hamilton 函数为

$$H=\int h\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3=\frac{1}{2}\int\left(\varepsilon_0E^2+\frac{1}{\mu_0}B^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}-\int\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{11.2.42}$$

显然对无源情况，Hamilton 函数为体系的总电磁能量.

11.3　电磁场的变换和电磁场的不变量

因为 $F_{\sigma\nu}$ 是四维张量，故有变换关系

$$F'_{\sigma\nu} = a_{\sigma\alpha} a_{\nu\tau} F_{\alpha\tau} \tag{11.3.1}$$

对照式(11.2.14)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{B}' &= (F'_{23}, F'_{31}, F'_{12}) = (a_{2\sigma}a_{3\tau}F_{\sigma\tau}, a_{3\sigma}a_{1\tau}F_{\sigma\tau}, a_{1\sigma}a_{2\tau}F_{\sigma\tau}) \\ \boldsymbol{E}' &= \frac{c}{\mathrm{i}}(F'_{41}, F'_{42}, F'_{43}) = \frac{c}{\mathrm{i}}(a_{4\sigma}a_{1\tau}F_{\sigma\tau}, a_{4\sigma}a_{2\tau}F_{\sigma\tau}, a_{4\sigma}a_{3\tau}F_{\sigma\tau}) \end{aligned} \tag{11.3.2}$$

具体计算后得到

$$\begin{aligned} &E'_1 = E_1; && B'_1 = B_1 \\ &E'_2 = \frac{(E_2 - vB_3)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}; && B'_2 = \frac{(B_2 + vE_3/c^2)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \\ &E'_3 = \frac{(E_3 + vB_2)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}; && B'_3 = \frac{(B_3 - vE_2/c^2)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned} \tag{11.3.3}$$

上式中只要：①把等号左边的撇号去除；②等号右边的场量加撇；③把 $\boldsymbol{v}$ 改成 $(-\boldsymbol{v})$ 即可得到反变换. 若把场分解成与相对速度平行和垂直的分量，即 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_{\parallel} + \boldsymbol{E}_{\perp}$ 和 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_{\parallel} + \boldsymbol{B}_{\perp}$，那么上式可以写成更紧凑的形式

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{E}'_{\parallel} = \boldsymbol{E}_{\parallel}; && \boldsymbol{B}'_{\parallel} = \boldsymbol{B}_{\parallel} \\ &\boldsymbol{E}'_{\perp} = \frac{(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})_{\perp}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}; && \boldsymbol{B}'_{\perp} = \frac{(\boldsymbol{B} - \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{E}/c^2)_{\perp}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \end{aligned} \tag{11.3.4}$$

例 11.3.1　匀速运动电荷的场.

解：设 S' 坐标系建立在电荷上，原点为电荷位置. 在 S' 系，电荷静止，于是电场和磁场为

$$E'_x = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{x'}{r'^3};\quad E'_y = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{y'}{r'^3};\quad E'_z = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{z'}{r'^3} \tag{11.3.5}$$

$$B'_x = 0;\quad B'_y = 0;\quad B'_z = 0 \tag{11.3.6}$$

利用变换(11.3.3)的逆变换，在 S 系，即实验室坐标系中

$$E_x = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{x'}{r'^3};\quad E_y = \gamma\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{y'}{r'^3};\quad E_z = \gamma\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{z'}{r'^3} \tag{11.3.7}$$

$$B_x = 0;\quad B_y = -\gamma\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{v}{c^2}\frac{z'}{r'^3};\quad B_z = \gamma\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{v}{c^2}\frac{y'}{r'^3} \tag{11.3.8}$$

利用 Lorentz 变换(11.1.11)

$$E_x = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\gamma(x - vt)}{R^3};\quad E_y = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\gamma y}{R^3};\quad E_z = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\gamma z}{R^3} \tag{11.3.9}$$

$$B_x = 0; \quad B_y = -\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{v}{c^2}\frac{\gamma z}{R^3}; \quad B_z = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{v}{c^2}\frac{\gamma y}{R^3} \tag{11.3.10}$$

其中 $R^2=\gamma^2(x-vt)^2+y^2+z^2$. 分两种情况讨论.

1. $v\ll c,\gamma\approx 1$,式(11.3.9)和(11.3.10)可写成

$$\boldsymbol{E} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}; \quad \boldsymbol{B} = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{q\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{11.3.11}$$

其中 $\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_1+y\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3$,可见,低速运动的电荷激发的电场与静电场一样,而磁场与稳恒电流激发的场一样;

2. $v\approx c,\gamma\gg 1$,设 $t=0$ 时电荷刚好与 S 系的原点重合,仅分析 $t=0$ 时刻电场和磁场分布

$$\boldsymbol{E} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\gamma}{R^3}\boldsymbol{r}; \quad \boldsymbol{B} = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E} \tag{11.3.12}$$

其中 $R^2=\gamma^2x^2+y^2+z^2$. 因为

$$R = \gamma\sqrt{x^2+\frac{y^2}{\gamma^2}+\frac{z^2}{\gamma^2}} = \gamma\sqrt{(1-\beta^2)r^2+\frac{v^2}{c^2}x^2} \tag{11.3.13}$$

又 $\boldsymbol{v}=v\boldsymbol{e}_1$, $vx=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}$,令 $\boldsymbol{v}$ 与 $\boldsymbol{r}$ 的夹角为 ϑ: $vx=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}=vr\cos\vartheta$,因此上式变成

$$R = \gamma r\sqrt{(1-\beta^2)+\beta^2\cos^2\vartheta} = \gamma r\sqrt{(1-\beta^2\sin^2\vartheta)} \tag{11.3.14}$$

代入方程(11.3.12)得到 $t=0$ 时刻的电场

$$\boldsymbol{E} = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{(1-\beta^2)}{r^3[(1-\beta^2\sin^2\vartheta)]^{3/2}}\boldsymbol{r} \tag{11.3.15}$$

在垂直方向 $\vartheta=\pi/2$:

$$E_\perp = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\gamma}{r^2} \gg \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2} \tag{11.3.16}$$

在平行方向 $\vartheta=0$:

$$E_\parallel = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}(1-\beta^2)\frac{1}{r^2} \ll \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2} \tag{11.3.17}$$

因此在 S 系看,平行于运动方向的电场变小、垂直于运动方向的电场变大,而在 S' 系看来,两个方向大小是一样的. 当 $v\to c$, $E_\parallel=0$, $E_\perp\to\infty$,即电场基本集中在垂直运动方向,如图 11.3.1.

能流密度矢量为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_e &= \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B} = \frac{1}{\mu_0 c^2}[\boldsymbol{E}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E})] \\ &= \frac{1}{\mu_0 c^2}[E^2\boldsymbol{v}-(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v})\boldsymbol{E}]\end{aligned} \tag{11.3.18}$$

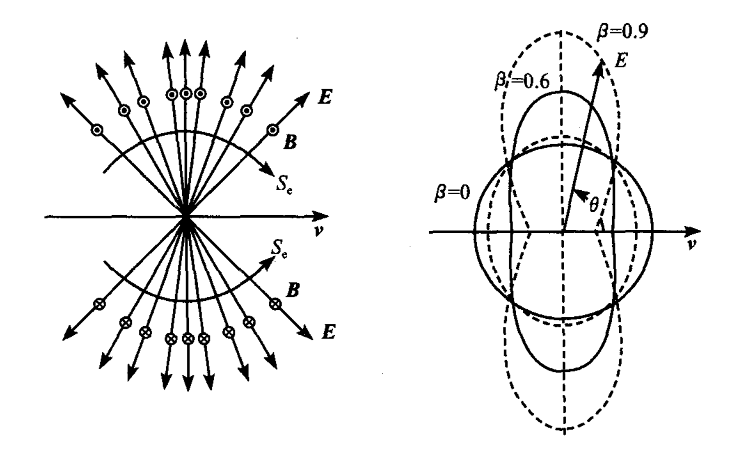


图 11.3.1　运动电荷产生的场和辐射能流

$\boldsymbol{S}_e$ 的径向分量为

$$\boldsymbol{S}_e \cdot \boldsymbol{r} = \frac{1}{\mu_0 c^2}[E^2(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v})(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r})] \tag{11.3.19}$$

而 $\boldsymbol{E}\sim\boldsymbol{r}$，故上式给出 $\boldsymbol{S}_e\cdot\boldsymbol{r}=0$，即没有能流沿径向辐射出去，如图 11.3.1. 当 $v\to c$ 时，$E_{\parallel}\approx 0$，只有垂直分量，$\boldsymbol{E}\perp\boldsymbol{v}$，即 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}\approx 0$，于是

$$\boldsymbol{S}_e = \frac{1}{\mu_0 c^2}(\boldsymbol{v}E_{\perp}^2) = w\boldsymbol{v} \tag{11.3.20}$$

上式表明：在实验室坐标系看来，电磁场能量以速度 $\boldsymbol{v}$ 随电荷一起运动.

电磁场的不变量：由以上讨论，我们知道在不同的惯性参考系中，测量电磁场具有不同的结果. 似乎 Lorentz 变换可以使 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 具有任意值. 事实上，这只是问题的一个方面，另一方面电场与磁场的相对性中还包含着绝对的一面，即存在一些电磁场的不变量，它们在 Lorentz 变换下保持不变. 由电磁场的变换关系式(11.3.3)，不难证明两个不变量(见习题 11.1)

$$B^2 - \frac{E^2}{c^2} = \text{不变量};\quad \boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B} = \text{不变量} \tag{11.3.21}$$

事实上可以证明电磁场只存在这两个独立的不变量. 从上式我们可以得到如下结论：

1. 若电磁场在某一个惯性参考系内垂直 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}=0$，则在所有的惯性参考系内电场与磁场垂直；

2. 若电磁场在某一个惯性参考系内有关系 $E=cB$，则在所有的惯性参考系内 $E'=cB'$；

3. 若某一个惯性参考系内 $E>cB$，则找不到一个惯性参考系使 $E'\leqslant cB'$；

4. 若在某一个惯性参考系内 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}=0$，总能够找到一个惯性参考系，在这个惯性参考系内中仅存在电场或者磁场(由 $E>cB$ 或者 $E<cB$ 决定).

上述结论 1-3 可直接从式(11.3.21)得到. 结论 4 证明:假定在 S' 系内只存在磁场,则由式(11.3.3),要求

$$E_1 = 0; \quad E_2 - vB_3 = 0; \quad E_3 + vB_2 = 0 \tag{11.3.22}$$

故

$$v = \frac{E_2}{B_3}; \quad v = -\frac{E_3}{B_2} \tag{11.3.23}$$

上式要求 $E_2B_2 + E_3B_3 = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{B} = 0$. 对假定在 S' 系内只存在电场情况,证明过程类似.

11.4 粒子在电磁场中的运动和 Hamilton 函数

Lorentz 变换由光速不变原理推出,Maxwell 方程组在 Lorentz 变换下显然具有不变性. 那么牛顿力学必须修改,以满足在 Lorentz 变换下具有不变性的相对性原理.

四维速度和加速度:在牛顿力学中,质点的位置由(x,y,z)决定,它们是时间的函数,时间 t 仅仅起参量的作用,速度是时间 t 的导数. 而在 Minkowski 四维空间中,$x_4 = \mathrm{i}ct$,时间也是四维空间坐标之一,与其他三个空间坐标是平等的,显然不能用时间的导数来定义四维速度和加速度,并且在不同的参考系,时间 t 是不同的. 而我们希望用一个不变量作为参量,起牛顿力学中时间 t 的参量作用. 由式(11.1.21),我们知道四维间隔 $\mathrm{d}s^2$ 是不变量,即

$$\begin{aligned} \mathrm{d}s^2 &= \mathrm{d}x_\mu \mathrm{d}x_\mu = \mathrm{d}s'^2 = \mathrm{d}x'_\mu \mathrm{d}x'_\mu \\ &= \mathrm{d}x_1^2 + \mathrm{d}x_2^2 + \mathrm{d}x_3^2 - c^2\mathrm{d}t^2 \\ &= \mathrm{d}x_1'^2 + \mathrm{d}x_2'^2 + \mathrm{d}x_3'^2 - c^2\mathrm{d}t'^2 \end{aligned} \tag{11.4.1}$$

在时钟静止的参考系 S' 的同一地点,$\mathrm{d}x'_1 = \mathrm{d}x'_2 = \mathrm{d}x'_3 = 0$,而时间间隔 $\mathrm{d}t'$ 称为**固有时间**或称为**原时间隔**,$\mathrm{d}t' = \mathrm{d}\tau$. 因此上式化为

$$\mathrm{d}s^2 = -c^2\mathrm{d}\tau^2 \tag{11.4.2}$$

显然原时间隔和四维间隔 $\mathrm{d}s^2$ 都是 Lorentz 变换下的不变量,可用来定义四维速度和加速度. 由方程(11.1.14),可得到原时间隔 $\mathrm{d}\tau$ 与时间微分元 $\mathrm{d}t$ 的关系

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.4.3}$$

于是定义四维速度和加速度如下

$$U_\sigma = \frac{\mathrm{d}x_\sigma}{\mathrm{d}\tau}; \quad a_\sigma = \frac{\mathrm{d}U_\sigma}{\mathrm{d}\tau} \quad (\sigma = 1,2,3,4) \tag{11.4.4}$$

利用式(11.4.3),显然

$$U_\sigma = \frac{\mathrm{d}x_\sigma}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\frac{\mathrm{d}x_\sigma}{\mathrm{d}t} \tag{11.4.5}$$

或者

$$U_\sigma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\frac{\mathrm{d}x_\sigma}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{\mathrm{i}c}{\sqrt{1-\beta^2}}\right) \tag{11.4.6}$$

同样

$$\begin{aligned} a_\sigma &= \frac{\mathrm{d}U_\sigma}{\mathrm{d}\tau} = \frac{\mathrm{d}U_\sigma}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{\mathrm{i}c}{\sqrt{1-\beta^2}}\right) \end{aligned} \tag{11.4.7}$$

四维动量:定义四维动量

$$P_\sigma = m_0 U_\sigma \quad (\sigma = 1,2,3,4) \tag{11.4.8}$$

其中 m_0 为质点速度等于零时的质量,称为**静止质量**,由式(11.4.6)

$$P_\sigma = \left(\frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}, \frac{\mathrm{i}m_0 c}{\sqrt{1-\beta^2}}\right) \tag{11.4.9}$$

动力学方程和四维力矢量:类似于牛顿第二定律,相对论运动方程定义为

$$\frac{\mathrm{d}P_\sigma}{\mathrm{d}\tau} = K_\sigma \quad (\sigma = 1,2,3,4) \tag{11.4.10}$$

其中 K_σ 是四维力矢量. 为了构造四维力矢量,考虑 Lorentz 力密度矢量,由式(11.2.20),力密度矢量的前三个分量和第四个分量分别为

$$(f_1, f_2, f_3) = \boldsymbol{f} = \rho(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}) \tag{11.4.11}$$

和

$$f_4 = \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E} = \frac{\mathrm{i}}{c}(\rho\boldsymbol{v})\cdot\boldsymbol{E} = \frac{\mathrm{i}}{c}\rho(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{v} = \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v} \tag{11.4.12}$$

显然 $\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}$ 是功率密度. 因此四维力密度矢量的前三个分量为三维力矢量,而第四个分量表示功率密度,即

$$f_\mu = \left(\boldsymbol{f}, \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}\right) \tag{11.4.13}$$

由上式和式(11.2.19)知,四维 Lorentz 力密度矢量是电磁场 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 和速度 $\boldsymbol{v}$ 的函数,可由电磁张量 $F_{\sigma\lambda}$ 与四维速度矢量 U_λ 构成协变量. 故定义带电量为 q 的粒子受到的四维 Lorentz 力矢量为

$$K_\sigma = qF_{\sigma\lambda}U_\lambda \quad (\sigma = 1,2,3,4) \tag{11.4.14}$$

写成显式为

$$K_\sigma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(\boldsymbol{F}, \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v}\right) \tag{11.4.15}$$

其中 $\boldsymbol{F}=q(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$. 于是由(11.4.10)得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}},\frac{\mathrm{i}m_0c}{\sqrt{1-\beta^2}}\right]=\left(\boldsymbol{F},\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v}\right) \tag{11.4.16}$$

或者

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}\right]=\boldsymbol{F};\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\right]=\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v} \tag{11.4.17}$$

如果把质点的动量写成相对论形式

$$\boldsymbol{p}=\frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}\equiv m\boldsymbol{v} \tag{11.4.18}$$

那么质点运动方程仍有经典力学的形式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{F} \tag{11.4.19}$$

方程(11.4.18)中 $m=m_0/\sqrt{1-\beta^2}$ 称为**运动质量**. 方程(11.4.17)中第二式右边表示外力做功,而左边应该是质点能量的增加,定义能量

$$W=\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}=mc^2 \tag{11.4.20}$$

当 $\beta=v/c\ll1$ 时

$$W\approx m_0c^2+\frac{1}{2}m_0v^2 \tag{11.4.21}$$

因此 W 是质点的总能量. 方程(11.4.20)称为**质-能关系**,m_0c^2 称为**静止能量**. 由(11.4.18)和(11.4.20)得到

$$W^2=c^2p^2+m_0^2c^4 \tag{11.4.22}$$

必须指出:我们由 Lorentz 力推导出了狭义相对论动力学方程(11.4.17),对其他力的形式可作一般推广. 但是只有满足狭义相对论协变性的力才能应用方程(11.4.17)来讨论粒子的运动,而对不满足协变性的力,不能作推广,如引力必须用广义相对论来讨论.

动量-能量变换:由式(11.4.9)和(11.4.20),四维动量矢量为

$$P_\sigma=\left(\boldsymbol{p},\frac{\mathrm{i}}{c}W\right) \tag{11.4.23}$$

因为 P_σ 是四维矢量,满足矢量变换定义

$$P'_\sigma=a_{\sigma\lambda}P_\lambda\quad(\sigma=1,2,3,4) \tag{11.4.24}$$

即

$$\begin{pmatrix}P'_1\\P'_2\\P'_3\\P'_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\gamma&0&0&\mathrm{i}\beta\gamma\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\-\mathrm{i}\beta\gamma&0&0&\gamma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}P_1\\P_2\\P_3\\P_4\end{pmatrix} \tag{11.4.25}$$

因此我们得到动量-能量的坐标变换关系

$$p_1' = \gamma p_1 + \mathrm{i}\beta\gamma P_4 = \frac{p_1 - vW/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad p_2' = p_2;\quad p_3' = p_3 \tag{11.4.26}$$

$$W' = -\beta c\gamma p_1 + \gamma W = \frac{W - vp_1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{11.4.27}$$

例 11.4.1　一初速度为零、静止质量为 m_0 的带电粒子 q 在电磁场中运动，设电场和磁场分别为 $\boldsymbol{E}=(0,E,0)$，$\boldsymbol{B}=(0,0,B)$，求在电场为零的参考系中粒子的运动轨迹.

解： 设 S'系沿 x 轴相对于 S 系以速度 v 运动，在 S'系中只有磁场而没有电场，即要求 $\boldsymbol{E}'=0$. 根据场的变换关系式(11.3.3)

$$\begin{aligned}
&E_1' = E_1 = 0; && B_1' = B_1 = 0\\
&E_2' = \frac{(E_2 - vB_3)}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = 0; && B_2' = \frac{(B_2 + vE_3/c^2)}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = 0\\
&E_3' = \frac{(E_3 + vB_2)}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = 0; && B_3' = \frac{(B_3 - vE_2/c^2)}{\sqrt{1-v^2/c^2}}
\end{aligned} \tag{11.4.28}$$

故得到运动速度和 S'系中的磁场分别为

$$v = \frac{E}{B};\quad B_3' = \frac{1}{\sqrt{1-E^2/c^2B^2}}\left(B - \frac{1}{c^2}\frac{E^2}{B^2}\right) = \frac{1}{c}\sqrt{c^2B^2 - E^2} \tag{11.4.29}$$

上式显然要求 $E<cB$. 根据方程(11.4.17)，粒子的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}'}{\mathrm{d}t'} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\left[\frac{m_0\boldsymbol{u}'}{\sqrt{1-\beta^2}}\right] = q\boldsymbol{u}' \times \boldsymbol{B}' \tag{11.4.30}$$

$$\frac{\mathrm{d}W'}{\mathrm{d}t'} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\left[\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\right] = q(\boldsymbol{u}' \times \boldsymbol{B}') \cdot \boldsymbol{u}' \equiv 0 \tag{11.4.31}$$

其中 $\beta=u'/c$. 注意：式(11.4.28)中的速度 v 是 S'相对于 S 的运动速度，而上式中的速度 u'是带点粒子的运动速度. 由 $W'^2=c^2p'^2+m_0^2c^4$，如果 $W'=$常量，那么也有 $p'=$常量，因此 $u'=$常量，故 $\boldsymbol{p}'$和 $\boldsymbol{u}'$的大小不变，仅仅方向变化. 于是式(11.4.30)简化成

$$\frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}'}{\mathrm{d}t'} = q\boldsymbol{u}' \times \boldsymbol{B}' \tag{11.4.32}$$

上式的两个分量为

$$\frac{\mathrm{d}u_1'}{\mathrm{d}t'} = \frac{q\sqrt{1-\beta^2}B_3'}{m_0}u_2';\quad \frac{\mathrm{d}u_2'}{\mathrm{d}t'} = -\frac{q\sqrt{1-\beta^2}B_3'}{m_0c}u_1' \tag{11.4.33}$$

故在 S'系粒子作圆周运动，角频率为

$$\omega = \frac{q\sqrt{1-\beta^2}B_3'}{m_0} = \frac{q\sqrt{(c^2B^2-E^2)(1-\beta^2)}}{m_0 c} \tag{11.4.34}$$

粒子在 S 系中初速度为零，由速度变换公式(11.1.20)，当 $t'=0$ 时

$$u_x'|_{t'=0} = \left(\frac{u_x - v}{1 - vu_x/c^2}\right)_{t=0} = -v = -\frac{E}{B} \tag{11.4.35}$$

故 $\sqrt{1-\beta^2}=\sqrt{1-u'^2/c^2}=\sqrt{1-E^2/c^2B^2}$，代入式(11.4.34)得到

$$\omega = \frac{q(c^2B^2-E^2)}{m_0c^2B} \tag{11.4.36}$$

由初始条件式(11.4.35)，方程(11.4.33)的解为

$$u_1' = \frac{E}{B}\cos\omega t'; \quad u_2' = \frac{E}{B}\sin\omega t' \tag{11.4.37}$$

由于 x 方向的 Lorentz 长度收缩，故在 S 系中看到粒子作椭圆运动，x 方向的半轴为短半轴.

最后讨论带电粒子在电磁场中运动的 Lagrange 函数和 Hamilton 函数.

Lagrange 函数：根据狭义相对论的相对性原理，作用量

$$J = \int L\mathrm{d}t \tag{11.4.38}$$

应该是不变量，上式可以写成

$$J = \int L\mathrm{d}t = \int \frac{L}{\sqrt{1-\beta^2}}\mathrm{d}\tau \tag{11.4.39}$$

而原时间隔 $\mathrm{d}\tau$ 是不变量，故 $L/\sqrt{1-\beta^2}$ 应该是不变量. 另一方面，与粒子运动状态有关的量可分成两类：直接与运动速度有关的量，即四维速度矢量 U_σ；与粒子在外场中受力有关的量，即电磁场张量 $F_{\sigma\nu}$ 或者四维矢量势 A_σ. 由 A_σ 和 U_σ 可以构成四维空间的两个标量：$U_\sigma U_\sigma$ 和 $A_\sigma U_\sigma$，显然不变量 $L/\sqrt{1-\beta^2}$ 应该是这两个标量的线性组合，即

$$L/\sqrt{1-\beta^2} = aU_\sigma U_\sigma + bA_\sigma U_\sigma \tag{11.4.40}$$

写成明显的表达式即为

$$L = -ac^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} - b(\Phi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{11.4.41}$$

常量 a 和 b 可由非相对论极限得到：当 $v \ll c$ 时，上式为

$$L \approx -ac^2 + \frac{1}{2}av^2 - b(\Phi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{11.4.42}$$

可见常量 $a=m_0$，而 b 显然应该与电量 q 有关，故取 $b=q$. 于是 Lagrange 函数为

$$L = -m_0c^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} - q(\Phi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{11.4.43}$$

将 L 代入 Lagrange 方程(见第5章)可得带电粒子的运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{m_0 \boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)=q(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}) \tag{11.4.44}$$

上式与方程(11.4.17)中的第一式是完全一致的.

Hamilton 函数:由 Lagrange 函数得到广义动量为

$$P_x=\frac{\partial L}{\partial v_x}=\frac{m_0 v_x}{\sqrt{1-v^2/c^2}}+qA_x \tag{11.4.45}$$

$$P_y=\frac{\partial L}{\partial v_y}=\frac{m_0 v_y}{\sqrt{1-v^2/c^2}}+qA_y \tag{11.4.46}$$

$$P_z=\frac{\partial L}{\partial v_z}=\frac{m_0 v_z}{\sqrt{1-v^2/c^2}}+qA_z \tag{11.4.47}$$

广义动量写成矢量形式为

$$\boldsymbol{P}=\frac{m_0\dot{\boldsymbol{v}}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}+q\boldsymbol{A}=\boldsymbol{p}+q\boldsymbol{A} \tag{11.4.48}$$

故 Hamilton 函数为

$$H=P_x v_x+P_y v_y+P_z v_z-L=\sqrt{(\boldsymbol{P}-q\boldsymbol{A})^2c^2+m_0^2c^4}+q\Phi \tag{11.4.49}$$

注意:式(11.4.48)中的正则动量与式(7.4.24)完全一致,因此运动电荷的广义动量包括两部分:运动动量 $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$ 和电磁场动量 $q\boldsymbol{A}$. 显然非相对论的 Lagrange 函数和 Hamilton 函数为

$$L=\frac{1}{2}m_0v^2-q(\Phi-\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A});\quad H=\frac{1}{2m_0}(\boldsymbol{P}-q\boldsymbol{A})^2+q\Phi \tag{11.4.50}$$

其中已忽略了静止质量能量. 注意:(11.4.50)式与第1章的结果是完全一致的.

习　题　11

11.1　证明 E^2/c^2-B^2 和 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}$ 为 Lorentz 变换的不变量.(提示:利用电磁场的变换关系,直接代入即可)

11.2　两块相距为 d 的非导电无限大平行板,它们以速度 $\beta=v/c\sim1$ 沿 x 轴运动,在板静止的参考系内,上下板分别有均匀电荷密度 $+\sigma$ 和 $-\sigma$. 求两板之间的电场和磁场.(提示:在板静止的参考系内,只有电场 $\boldsymbol{E}'=-\boldsymbol{e}_z\sigma/\varepsilon_0$)

答案:$E_z=-\dfrac{\sigma}{\varepsilon_0\sqrt{1-\beta^2}}$;$B_y=\dfrac{v\sigma}{\varepsilon_0c^2\sqrt{1-\beta^2}}$,其他分量为零.

11.3　一个初速度为零、静止质量为 m_0 的带电粒子 q 在电磁场中运动,设电

场和磁场分别为 $\boldsymbol{E}=(0,E,0)$，$\boldsymbol{B}=(0,0,B)$，求在磁场为零的参考系中粒子的运动轨迹.（提示：在 S' 中，初始条件为 $u_x'|_{t'=0}=-c^2B/E$，$u_y'|_{t'=0}=u_z'|_{t'=0}=0$）

答案：

$$v=\frac{c^2B}{E};\quad \boldsymbol{E}'=\sqrt{E^2-c^2B^2}\boldsymbol{e}_y;\quad p'_x(t')=\frac{m_0u'_x|_{t'=0}}{\sqrt{1-u'^2/c^2}}=-\frac{c^2m_0B}{\sqrt{E^2-c^2B^2}},$$

$p_y'(t')=q\sqrt{E^2-c^2B^2}t'$，$p_z'(t')=0$，要求 $E>cB$.

11.4 (1) 证明电磁波的波矢量和频率，即

$$k_\sigma=\left(\boldsymbol{k},\mathrm{i}\frac{\omega}{c}\right)$$

组成四维矢量；(2) 求波矢量和频率的坐标变换关系；(3) 证明 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t$ 是不变量.（提示：(1) 由光速不变原理 $c=\omega/k=\omega'/k'$，证明 $k_\sigma k_\sigma=k'_\sigma k'_\sigma=0$；(2) 由 $k'_\sigma=a_{\sigma\nu}k_\nu$ 得到变换关系；(3) 证明 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t=k_\sigma x_\sigma$）

答案：(2) $k_1'=\gamma(k_1+\mathrm{i}\beta k_4)$，$k_2'=k_2$，$k_3'=k_3$，$k_4'=\gamma(-\mathrm{i}\beta k_1+k_4)$.

11.5 在参考系 S 中电场 $\boldsymbol{E}$ 与磁场 $\boldsymbol{B}$ 垂直，参考系 S' 以 v 速度在 $\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$ 方向相对参考系 S 运动. 求速度 $\boldsymbol{v}$，使参考系 S' 中只有电场或者只有磁场.（提示：在参考系 S 中 $\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B}=0$，又 $\boldsymbol{v}$ 的方向为 $\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$，即 $\boldsymbol{v}\parallel\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$，故 $\boldsymbol{E}_\parallel=\boldsymbol{B}_\parallel=0$；计算 $\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$ 从而求 $\boldsymbol{v}$(注意条件：$\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{E}=0$；$\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{B}=0$)）

答案：只有磁场：$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}/B^2$，并且要求 $cB>E$，磁场为

$$\boldsymbol{B}'=\sqrt{1-\frac{E^2}{c^2B^2}}\boldsymbol{B}$$

只有电场：$\boldsymbol{v}=c^2(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})/E^2$，并且要求 $cB<E$，电场为

$$\boldsymbol{E}'=\sqrt{1-\frac{c^2B^2}{E^2}}\boldsymbol{E}.$$

11.6 在参考系 S 中电场和磁场分别为 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$，如果在参考系 S' 内，电场与磁场平行，求参考系 S' 的速度.（提示：因 $\boldsymbol{E}'\parallel\boldsymbol{B}'$，对应分量成比例，即 $\frac{E_y'}{B_y'}=\frac{E_z'}{B_z'}$）

答案：$\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}}{2(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})^2}\left[c^2B^2+E^2-\sqrt{(c^2B^2-E^2)^2+4c^2(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{B})^2}\right]$.

11.7 证明真空中的平面单色电磁波满足的横波条件

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{E}=0,\quad \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{B}=0$$

是 Lorentz 变换不变的.（提示：$k_\sigma F_{\sigma\nu}=0$ 协变，由此展开得到关系 $\boldsymbol{E}=c\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{k}/k$，两边平方；注意：真空中的平面单色波满足 $E^2=c^2B^2$）

11.8 在以速度 v 沿 x 方向运动的参考系内，已知粒子的能量、速度和运动方向分别为 E'、$\boldsymbol{v}'$ 和 ϑ'（即 $\boldsymbol{v}'$ 与 $\boldsymbol{v}$ 的夹角），求在静止的参考系中粒子的能量和运动方向.（提示：在 S' 系中，四维动量为 $p_\mu'=(p'\cos\vartheta',p'\sin\vartheta',\mathrm{i}E'/c)$）

答案：$\tan\vartheta=\dfrac{p_y}{p_x}=\dfrac{1}{\gamma}\dfrac{\sin\vartheta'}{\cos\vartheta'+v/v'}$.

11.9　一无限长圆柱均匀带电，单位长度的电荷为 λ_0，沿轴向有均匀分布的电流 I_0. 求参考系 S'，在 S' 只有电场或磁场，并求相应的场分布.（提示：以圆柱轴向为 x 方向，柱坐标中

$$\boldsymbol{E}=\frac{\lambda_0}{2\pi\varepsilon_0\rho}\boldsymbol{e}_\rho;\quad \boldsymbol{B}=\frac{\mu_0 I_0}{2\pi\rho}\boldsymbol{e}_\varphi$$

其中 $\rho=\sqrt{y^2+z^2}$，单位矢量的坐标变换为

$$\boldsymbol{e}_\rho=\cos\varphi\boldsymbol{e}_y+\sin\varphi\boldsymbol{e}_z;\quad \boldsymbol{e}_\varphi=-\sin\varphi\boldsymbol{e}_y+\cos\varphi\boldsymbol{e}_z;$$

变换到直角坐标

$$E_x=0,\quad E_y=\frac{\lambda_0}{2\pi\varepsilon_0}\frac{y}{y^2+z^2},\quad E_z=\frac{\lambda_0}{2\pi\varepsilon_0}\frac{z}{y^2+z^2}$$

$$B_x=0,\quad B_y=-\frac{\mu_0 I_0}{2\pi}\frac{z}{y^2+z^2},\quad B_z=\frac{\mu_0 I_0}{2\pi}\frac{y}{y^2+z^2}$$

然后用场变换公式. 注意：$y=y'$；$z=z'$）

答案：当 $\lambda_0<I_0/c$，取 $v=c^2\lambda_0/I_0$，只有磁场

$$B'_y=-\frac{\mu_0 I_0}{2\pi}\sqrt{\left(1-\frac{c^2\lambda_0^2}{I_0^2}\right)}\frac{z'}{y'^2+z'^2}$$

$$B'_z=\frac{\mu_0 I_0}{2\pi}\sqrt{\left(1-\frac{c^2\lambda_0^2}{I_0^2}\right)}\frac{y'}{y'^2+z'^2}$$

当 $\lambda_0>I_0/c$，取 $v=I_0/\lambda_0$，只有电场

$$E'_y=\frac{\lambda_0}{2\pi\varepsilon_0}\sqrt{\left(1-\frac{I_0^2}{c^2\lambda_0^2}\right)}\frac{y'}{y'^2+z'^2}$$

$$E'_z=-\frac{\lambda_0}{2\pi\varepsilon_0}\sqrt{\left(1-\frac{I_0^2}{c^2\lambda_0^2}\right)}\frac{z'}{y'^2+z'^2}.$$

11.10　从四维速度矢量

$$U_\sigma=\frac{1}{\sqrt{1-u^2/c^2}}\frac{\mathrm{d}x_\sigma}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{\boldsymbol{u}}{\sqrt{1-u^2/c^2}},\frac{\mathrm{i}c}{\sqrt{1-u^2/c^2}}\right)$$

求速度变换公式，即证明方程(11.1.20).

第 12 章 电磁波的散射和衍射

当电磁波照射到带电粒子上时，带电粒子在电磁力的作用下作强迫振动，并向其他方向辐射电磁波，或者当电磁波照射到气体和凝聚态物质时，引起物质中电子、原子和分子的极化而向其他方向辐射电磁波，这些现象称为电磁波的**散射**. 当电磁波在传播过程中遇到障碍物且电磁波波长远大于障碍物线度时，再辐射的电磁波具有较好的空间相干性，在障碍物后形成干涉，称为电磁波的**衍射**. 电磁波散射和衍射的内容非常丰富，本章限于篇幅，仅介绍电磁波散射的若干方面，对电磁波的标量衍射理论则不作介绍.

12.1 微观带电粒子的散射和散射截面

当电磁波入射到电荷系上时，电荷在电磁力的作用下，以入射电磁波的频率作强迫振动. 假定电子处于束缚态(如原子中的电子)，可以把它描述成一个经典的谐振电子，束缚势能可用球对称的线性回复力 $m\omega_0^2\boldsymbol{r}$ 来模拟，其中 ω_0 是电子的本征频率. 此外，假定谐振电子除受辐射阻尼力外还存在另一类阻尼力(如由碰撞所造成的阻尼力)，用 $m\Gamma'\boldsymbol{r}$ 来表示. 注意：严规地说，应当用量子力学来处理本问题(见 15.4 节讨论)，但也可以从经典的角度来讨论，给出一些定性的结果和极为重要的概念. 此外，由 9.4 节讨论，平面单色电磁波的磁场矢量对电子的作用力可忽略. 设入射电场为 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{e}_0E_0\exp(-\mathrm{i}\omega t)$(这里把空间部分省略了)，于是束缚电子的运动方程为

$$\ddot{\boldsymbol{\xi}}+\omega_0^2\boldsymbol{\xi}=-\frac{e}{m}\boldsymbol{e}_0\boldsymbol{E}_0\exp(-\mathrm{i}\omega t)-\Gamma'\dot{\boldsymbol{\xi}}+\frac{2}{3}\frac{r_e}{c}\dddot{\boldsymbol{\xi}} \tag{12.1.1}$$

其中右边最后一项是辐射阻尼力，r_e 是电子的经典半径 $r_e=e^2/(4\pi\varepsilon_0mc^2)$，并且上式已假定电子振动的速度远小于光速. 容易求得方程(12.1.1)的解为

$$\boldsymbol{\xi}=-\frac{e}{m}\frac{E_0\boldsymbol{e}_0}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\Gamma}\exp(-\mathrm{i}\omega t) \tag{12.1.2}$$

其中 $\Gamma=\Gamma'+2r_e\omega^2/(3c)$. 由方程(10.4.27)，加速电子所激发的辐射场(即散射场)为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}&\approx\frac{e}{4\pi\varepsilon_0c^2|\boldsymbol{r}|}[\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times\ddot{\boldsymbol{\xi}})]\\&=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0mc^2}\frac{\omega^2E_0\boldsymbol{e}_s}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\Gamma}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}\exp[\mathrm{i}(k|\boldsymbol{r}|-\omega t)]\end{aligned} \tag{12.1.3}$$

$$\boldsymbol{B}=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mc^3}\frac{\omega^2E_0(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_s)}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\Gamma}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}\exp[\mathrm{i}(k|\boldsymbol{r}|-\omega t)] \tag{12.1.4}$$

其中 $\boldsymbol{e}_s=\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_0)$ 为散射波的偏振方向的矢量(注意:$\boldsymbol{e}_s$ 不是单位矢量). 平均能流密度为

$$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\frac{e^4E_0^2}{32\varepsilon_0\pi^2c^3m^2}\frac{\omega^4}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\Gamma^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|^2}[\boldsymbol{e}_s\times(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_s)] \tag{12.1.5}$$

为了考察不同方向的散射波,首先对诸矢量作分析. 设观察点矢径 $\boldsymbol{r}$(单位矢量 $\boldsymbol{e}_r$)与入射波偏振方向 $\boldsymbol{e}_0$ 的夹角为 ψ(如图 12.1.1),则

$$|\boldsymbol{e}_s|^2=|\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_0)|^2=\sin^2\psi \tag{12.1.6}$$

由矢量运算公式 $\boldsymbol{e}_s\times(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{e}_s)=|\boldsymbol{e}_s|^2\boldsymbol{e}_r-(\boldsymbol{e}_s\cdot\boldsymbol{e}_r)\boldsymbol{e}_s=\sin^2\psi\boldsymbol{e}_r$(注意:由 $\boldsymbol{e}_s$ 的定义,$\boldsymbol{e}_s$ 与 $\boldsymbol{e}_r$ 垂直),式(12.1.5)化成

$$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\frac{e^4E_0^2}{32\varepsilon_0\pi^2c^3m^2}\frac{\omega^4}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\Gamma^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|^2}\sin^2\psi\boldsymbol{e}_r \tag{12.1.7}$$

图 12.1.1　入射波偏振方向与散射波波矢量的关系

为了简单,但不失一般性,设入射波传播方向 $\boldsymbol{k}$ 为 z 方向,则偏振方向的单位矢量 $\boldsymbol{e}_0$ 必在 xOy 平面,设 $\boldsymbol{e}_0$ 与 x 轴的夹角为 φ';又设 $\boldsymbol{e}_r$ 的方位角和极角分别为 φ 和 ϑ. 那么 $\boldsymbol{e}_r$ 与 $\boldsymbol{e}_0$ 的夹角 ψ 满足

$$\cos\psi=\sin\vartheta\cos(\varphi-\varphi') \tag{12.1.8}$$

上式可由空间两矢量的夹角公式直接得到. 事实上,由图 12.1.1,$\boldsymbol{e}_0$ 和 $\boldsymbol{e}_r$ 可表示成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_0&=\cos\varphi'\boldsymbol{e}_x+\sin\varphi'\boldsymbol{e}_y\\ \boldsymbol{e}_r&=\sin\vartheta\cos\varphi\boldsymbol{e}_x+\sin\vartheta\sin\varphi\boldsymbol{e}_y+\cos\vartheta\boldsymbol{e}_z\end{aligned} \tag{12.1.9}$$

于是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{e}_0=\cos\psi&=\sin\vartheta\cos\varphi\cos\varphi'+\sin\vartheta\sin\varphi\sin\varphi'\\ &=\sin\vartheta\cos(\varphi-\varphi')\end{aligned}$$

即为式(12.1.8). 利用式(12.1.7)和(12.1.8),可以得到散射波平均能流密度的表达式. 但入射波一般是非偏振的,φ'可在$(0,2\pi)$之间变化,故首先对其求平均

$$\begin{aligned}\langle\sin^2\psi\rangle&=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\sin^2\psi\mathrm{d}\varphi'=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(1-\cos^2\psi)\mathrm{d}\varphi'\\ &=\frac{1}{2}(1+\cos^2\vartheta)\end{aligned} \tag{12.1.10}$$

代入式(12.1.7)得到

$$\langle\boldsymbol{S}_e\rangle=\frac{e^4E_0^2}{68\varepsilon_0\pi^2c^3m^2}\frac{\omega^4}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\Gamma^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}|^2}(1+\cos^2\vartheta)\boldsymbol{e}_r \tag{12.1.11}$$

于是，平均散射功率为

$$\langle P\rangle = \oint\!\!\!\oint_S \langle S_e\rangle \mid \boldsymbol{r} \mid^2 \mathrm{d}\Omega = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\langle S_e\rangle \mid \boldsymbol{r} \mid^2 \sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta$$
$$= \frac{8\pi}{3}r_e^2\left[\frac{\omega^4}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\Gamma^2}\right]I_0 \tag{12.1.12}$$

其中 $I_0=\varepsilon_0 cE_0^2/2$ 为平均入射能流. 根据电子的束缚状态，讨论如下：

1. 弱束缚态，$\omega\gg\omega_0$

$$\frac{\langle P\rangle}{I_0}\sim r_e^2 \tag{12.1.13}$$

即散射功率为常数，这是短波散射的特点；

2. 强束缚态，$\omega\ll\omega_0$

$$\frac{\langle P\rangle}{I_0}\sim r_e^2\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4 \tag{12.1.14}$$

即散射功率与频率的 4 次方成正比，这是所有长波散射的特点，称为 **Rayleigh 散射定律**；

3. 共振散射，$\omega\approx\omega_0$：

$$\frac{\langle P\rangle}{I_0}\sim r_e^2\left[\frac{\omega_0^2}{(\omega_0-\omega)^2+(\Gamma/2)^2}\right] \tag{12.1.15}$$

当 $\omega=\omega_0$ 时，$\langle P\rangle/I_0\sim r_e^2(\omega_0/\Gamma)^2$，而 $\omega_0/\Gamma\gg1$，故发生**共振散射**.

散射截面、吸收截面和总截面：从能量的角度来看，束缚态电子对电磁波的散射过程分两个阶段，先是电子从入射电磁波获得能量，然后以辐射次波的形式把其中一部分能量辐射到各个方向形成散射波，而另一部分能量则由于存在摩擦阻力而被消耗. 对散射部分，定义散射截面 σ_s 来表征，即

$$\sigma_s\equiv\frac{\langle P\rangle}{I_0}=\frac{8\pi}{3}r_e^2\left[\frac{\omega^4}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\Gamma^2}\right] \tag{12.1.16}$$

对于吸收部分，引入吸收截面 σ_a 来表征. 散射截面 σ_s 与吸收截面 σ_a 之和称为总截面 σ_t，即 $\sigma_t=\sigma_s+\sigma_a$. 入射波能量的损失为被散射的能量和被吸收的能量的总和，因此总截面在讨论散射问题中具有实际意义. 注意：未被散射和吸收的部分仍然按原方向传播. 为了求 σ_a，先求 σ_t，为此我们必须计算入射电磁波对束缚电子所做的功. 因为

$$\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\int\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{12.1.17}$$

束缚电子的电流密度可写成 $\boldsymbol{j}=-e\dot{\boldsymbol{\xi}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\xi})$，于是

$$\Delta W=-e\iint\boldsymbol{E}\cdot\dot{\boldsymbol{\xi}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\xi})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}t=-e\int\boldsymbol{E}\cdot\dot{\boldsymbol{\xi}}\mathrm{d}t \tag{12.1.18}$$

一个周期的平均为

$$\langle \Delta W \rangle = -\frac{1}{T} e \int_0^T \boldsymbol{E} \cdot \dot{\boldsymbol{\xi}} \mathrm{d}t = -\frac{e}{2} \mathrm{Re}(\boldsymbol{E}^* \cdot \dot{\boldsymbol{\xi}}) \tag{12.1.19}$$

式中 $\boldsymbol{E}^* = \boldsymbol{e}_0 E_0 \exp(\mathrm{i}\omega t)$，由方程(12.1.2)得到

$$\begin{aligned}\langle \Delta W \rangle &= -\frac{e^2 E_0^2}{2m} \mathrm{Re}\left[\frac{\mathrm{i}\omega}{\omega_0^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\omega\Gamma}\right] \\ &= \frac{e^2 E_0^2}{2m} \frac{\omega^2 \Gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega\Gamma)^2} \\ &= \frac{e^2}{mc\varepsilon_0} \frac{\omega^2 \Gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega\Gamma)^2} I_0 \end{aligned} \tag{12.1.20}$$

故总截面为

$$\sigma_{\mathrm{t}} = \frac{\langle \Delta W \rangle}{I_0} = \frac{e^2}{mc\varepsilon_0} \frac{\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega\Gamma)^2} \Gamma \tag{12.1.21}$$

因此由上式和方程(12.1.16)得到吸收截面

$$\sigma_{\mathrm{a}} = \sigma_{\mathrm{t}} - \sigma_{\mathrm{s}} = \frac{e^2}{mc\varepsilon_0} \frac{\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega\Gamma)^2} \Gamma' \tag{12.1.22}$$

在实际的散射问题中，入射波总有一定的频率分布，特殊情况是频率均匀分布，于是总的截面为

$$\int_0^\infty \sigma_{\mathrm{t}} \mathrm{d}\omega = \frac{e^2}{mc\varepsilon_0} \int_0^\infty \frac{\omega^2 \Gamma}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega\Gamma)^2} \mathrm{d}\omega \tag{12.1.23}$$

注意到一般阻尼力远大于辐射阻尼，即 $\Gamma = \Gamma' + 2r_{\mathrm{e}}\omega^2/(3c) \approx \Gamma'$，上式近似为

$$\int_0^\infty \sigma_{\mathrm{t}} \mathrm{d}\omega \approx \frac{e^2 \Gamma'}{2mc\varepsilon_0} \int_{-\infty}^\infty \frac{\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \Gamma'^2} \mathrm{d}\omega \tag{12.1.24}$$

利用留数定理积分不难得到

$$\int_0^\infty \sigma_{\mathrm{t}} \mathrm{d}\omega \approx \frac{\pi e^2}{2m\varepsilon_0} \tag{12.1.25}$$

有趣的是，上式只与电子的电荷和质量有关，而与外场和束缚体系的其他性质无关，称为**偶极求和定则**. 称“偶极”是因为我们仅考虑电子的偶极辐射时上式才成立.

12.2　电磁波在宏观物体上的散射和 Born 近似

下面讨论电磁波在任意形状的宏观物体上的散射，假定物体内没有自由电荷和传导电流，并且是非磁性介质，显然电磁场满足方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \nabla \cdot P; \quad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{12.2.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0; \quad \nabla \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} \tag{12.2.2}$$

其中 $\boldsymbol{P}$ 是介质的极化强度.电磁波可表示为入射波与散射波之和,即

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_i + \boldsymbol{E}_s \tag{12.2.3}$$

把极化强度 $\boldsymbol{P}$ 看作源分布,即

$$\rho = -\nabla \cdot \boldsymbol{P}; \quad j = \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t} \tag{12.2.4}$$

则由方程(10.2.1)和(10.2.2)得

$$\Phi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V \frac{[-\nabla' \cdot \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}',t')]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.5}$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int_V \frac{[\partial \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}',t')/\partial t']}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.6}$$

于是散射物外的电场矢量为

$$\boldsymbol{E}_s = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla\int_V \frac{[\nabla' \cdot \boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' - \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\partial}{\partial t}\int_V \frac{[\partial \boldsymbol{P}/\partial t']}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.7}$$

首先看第一项

$$\begin{aligned}
\nabla\int_V \frac{[\nabla' \cdot \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}',t')]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' &= \nabla\left\{\int_V \nabla' \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' - \int_V [\boldsymbol{P}] \cdot \nabla' \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right\} \\
&= \nabla\left\{\oint_S \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}dS'\right\} - \nabla\left\{\int_V [\boldsymbol{P}] \cdot \nabla' \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right\} \\
&= \nabla\left[\nabla \cdot \int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right]
\end{aligned}$$

第二项

$$\begin{aligned}
\frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\partial}{\partial t}\int_V \frac{[\partial \boldsymbol{P}/\partial t']}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' &= \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\
&= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla^2\int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'
\end{aligned} \tag{12.2.8}$$

上式最后一个等式是由于在散射物外,推迟矢量满足齐次波动方程

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = c^2\nabla^2\int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.9}$$

于是

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{E}_s &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla\left[\nabla \cdot \int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right] - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla^2\int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\
&= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla \times \left(\nabla \times \int_V \frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right)
\end{aligned} \tag{12.2.10}$$

其中已利用$\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})-\nabla^2\boldsymbol{A}=\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{A})$. 而在散射体内，由方程(12.2.1)第一式显然应该有

$$\boldsymbol{E}_s=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\nabla\times\left(\nabla\times\int_V\frac{[\boldsymbol{P}]}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right)-\frac{1}{\varepsilon_0}\boldsymbol{P} \tag{12.2.11}$$

另一方面，电极化矢量正比于电场强度，即

$$\boldsymbol{P}=\chi(\boldsymbol{r})\varepsilon_0\boldsymbol{E} \tag{12.2.12}$$

其中χ为介质的电极化率. 于是由方程(12.2.3)和(12.2.10)得到散射体外电场满足的方程

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_i+\frac{1}{4\pi}\nabla\times\left(\nabla\times\int_V\frac{\chi(\boldsymbol{r}')E(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right) \tag{12.2.13}$$

如果入射场是正弦电磁场

$$\boldsymbol{E}_i=\boldsymbol{E}_0\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t) \tag{12.2.14}$$

并注意到$t'=t-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/c$，式(12.2.13)简化为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=&\ \boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\\&+\frac{1}{4\pi}\nabla\times\left(\nabla\times\int_V\frac{\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right)\end{aligned} \tag{12.2.15}$$

同样由方程(12.2.3)和(12.2.11)，得到散射体内电场满足的方程

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})=&\ \boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})-\chi(\boldsymbol{r})E(\boldsymbol{r})\\&+\frac{1}{4\pi}\nabla\times\left(\nabla\times\int_V\frac{\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right)\end{aligned} \tag{12.2.16}$$

显然，上二式是关于$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$的积分方程，一般求解十分困难，但当散射体的介电常量ε接近ε_0(即$\varepsilon\approx\varepsilon_0$)，或者散射体的电极化率$\chi=\varepsilon/\varepsilon_0-1\ll 1$时可以用逐次迭代近似求解.

Born 近似：因为$\chi\ll 1$，可把χ看成微扰小参数，令方程(12.2.15)和(12.2.16)的微扰级数解为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}_{内}(\boldsymbol{r})&=\boldsymbol{E}_1^{(0)}(\boldsymbol{r})+\chi\boldsymbol{E}_1^{(1)}(\boldsymbol{r})+\chi^2\boldsymbol{E}_1^{(2)}(\boldsymbol{r})+\cdots\\\boldsymbol{E}_{外}(\boldsymbol{r})&=\boldsymbol{E}_2^{(0)}(\boldsymbol{r})+\chi\boldsymbol{E}_2^{(1)}(\boldsymbol{r})+\chi^2\boldsymbol{E}_2^{(2)}(\boldsymbol{r})+\cdots\end{aligned} \tag{12.2.17}$$

代入方程(12.2.15)和(12.2.16)得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}_1^{(0)}+\chi\boldsymbol{E}_1^{(1)}+\chi^2\boldsymbol{E}_1^{(2)}+\cdots=&\ \boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\\&+\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\chi[\boldsymbol{E}_1^{(0)}+\chi\boldsymbol{E}_1^{(1)}+\chi^2\boldsymbol{E}_1^{(2)}+\cdots]\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned}$$

$$-\chi[\boldsymbol{E}_1^{(0)}+\chi\boldsymbol{E}_1^{(1)}+\chi^2\boldsymbol{E}_1^{(2)}+\cdots] \tag{12.2.18}$$

$$\boldsymbol{E}_2^{(0)}+\chi\boldsymbol{E}_2^{(1)}+\chi^2\boldsymbol{E}_2^{(2)}+\cdots=\boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$$
$$+\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\chi[\boldsymbol{E}_2^{(0)}+\chi\boldsymbol{E}_2^{(1)}+\chi^2\boldsymbol{E}_2^{(2)}+\cdots]\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid)}{\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.19}$$

上二式中已假定在散射体中χ为常量. 比较χ的同次幂到二次得到

$$\boldsymbol{E}_1^{(0)}=\boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{12.2.20}$$

$$\boldsymbol{E}_1^{(1)}=\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\boldsymbol{E}_1^{(0)}(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid)}{\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{E}_1^{(0)}(\boldsymbol{r}) \tag{12.2.21}$$

$$\boldsymbol{E}_1^{(2)}=\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\boldsymbol{E}_1^{(1)}(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid)}{\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{E}_1^{(1)}(\boldsymbol{r}) \tag{12.2.22}$$

以及

$$\boldsymbol{E}_2^{(0)}=\boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{12.2.23}$$

$$\boldsymbol{E}_2^{(1)}=\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\boldsymbol{E}_2^{(0)}(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid)}{\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.24}$$

$$\boldsymbol{E}_2^{(2)}=\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\boldsymbol{E}_2^{(1)}(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid)}{\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.25}$$

可见零级近似即为入射波. 式(12.2.17)收敛的条件为

$$\mid\chi E^{(1)}\mid\ll E_0 \tag{12.2.26}$$

上述条件与入射波频率ω、散射体不均匀度,以及散射体线度l都有关,比较复杂. 在低频段,条件容易满足. 当只需要计算距离散射体足够远的场,可以把式(12.2.24)中的分母和指数分别作近似

$$\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid\approx\mid\boldsymbol{r}\mid,\quad \mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid\approx\mid\boldsymbol{r}\mid-\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{r}' \tag{12.2.27}$$

于是,一阶 Born 近似为

$$\boldsymbol{E}_s\approx\frac{\chi}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\int_V\frac{\boldsymbol{E}_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid)}{\mid\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\mid}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$
$$\approx\frac{\chi}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{E}_0\frac{\exp(\mathrm{i}k\mid\boldsymbol{r}\mid)}{\mid\boldsymbol{r}\mid}\int_V\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-k\boldsymbol{e}_r)\cdot\boldsymbol{r}']\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.2.28}$$

例 12.2.1 在一阶 Born 近似下,求电磁波被半径为R的电介质球的远场散射.

解: 由方程(12.2.28),令$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-k\boldsymbol{e}_r$,取球坐标的极轴为$\boldsymbol{q}$方向

$$\int_V\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi'\int_0^{\pi}\mathrm{d}\vartheta'\int_0^R r'^2\mathrm{d}r'\exp(\mathrm{i}qr'\cos\vartheta')$$

$$
\begin{aligned}
&= 4\pi\frac{\sin qR - qR\cos qR}{q^3} \\
&= \frac{4\pi R^3}{3}\left[\frac{3(\sin qR - qR\cos qR)}{(qR)^3}\right] \\
&= \frac{4\pi R^3}{3}\sqrt{\frac{\pi}{q^3R^3}}J_{3/2}(qR)
\end{aligned}
\tag{12.2.29}
$$

对远场散射问题，方程(12.2.28)中求双重旋度时，只要保留与$|\boldsymbol{r}|$成反比的项就可以了，即

$$
\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{E}_0\frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}|)}{|\boldsymbol{r}|}\approx -k^2[\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{E}_0)]\frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}|)}{|\boldsymbol{r}|}
\tag{12.2.30}
$$

上式和式(12.2.29)代入方程(12.2.28)得到

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{E}_s\approx -\frac{\chi\omega^2R^3}{3c^2}\sqrt{\frac{\pi}{q^3R^3}}J_{3/2}(qR)[\boldsymbol{e}_r\times(\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{E}_0)]\frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}|)}{|\boldsymbol{r}|} \\
&\boldsymbol{B}_s=\frac{1}{\mathrm{i}\omega}\nabla\times\boldsymbol{E}_s\approx\frac{1}{c}\boldsymbol{e}_r\times\boldsymbol{E}_s
\end{aligned}
\tag{12.2.31}
$$

其中 $q=|\boldsymbol{k}-k\boldsymbol{e}_r|=2k\sin(\vartheta/2)$，$\vartheta$ 是入射波波矢 $\boldsymbol{k}$ 与散射波波矢 $\boldsymbol{e}_r$ 的夹角，即**散射角**. 分两种情况讨论：

1. 波长远大于球半径：$kR\ll 1$（因而 $qR\ll 1$），利用近似

$$
J_{3/2}(qR)\approx\sqrt{\frac{q^3R^3}{9\pi}}
\tag{12.2.32}
$$

可以求得总散射截面

$$
\sigma_s\sim\frac{\omega^4R^6}{c^4}\chi^2
\tag{12.2.33}
$$

(12.2.23)式中为了避免复杂的角度积分，仅给出了比例关系.

2. 波长远小于球半径：$kR\gg 1$，因 $qR=2kR\sin(\vartheta/2)$，当 $\vartheta\sim 0$，$qR\sim 0$，由式(12.2.29)可见，散射很强；而当 $\vartheta\neq 0$ 时，$qR\gg 1$. 故向前散射占优势，可以证明此时的总散射截面

$$
\sigma_s\sim\frac{\omega^2R^4}{c^2}\chi^2
\tag{12.2.34}
$$

比较式(12.2.33)和(12.2.34)，可见高频和低频散射与频率的关系是完全不同的.

12.3　电磁波在周期结构中的散射和光子晶体

自然晶体：首先讨论周期结构为自然晶体中原子的周期排列. 原子间的间距大

约为 1Å，与 X 射线的波长在同一数量级，因此晶体可作为 X 射线的光栅. 由于晶体中原子排列的周期性，所有表征晶体性质的物理量都有周期特性，可以展成 Fourier 级数. 设 x,y,z 方向的空间周期分别为(a,b,c)，那么

$$\chi(\boldsymbol{r}) = \sum_{G} \chi_G \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{12.3.1}$$

式中求和遍及所有倒格矢 $\boldsymbol{G}$

$$\boldsymbol{G} = 2\pi\left(\frac{m}{a},\frac{n}{b},\frac{l}{c}\right) \quad (m,n,l = 0,\pm1,\pm2,\cdots) \tag{12.3.2}$$

另一方面，由方程(12.2.15)

$$\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi}\nabla\times\left(\nabla\times\int_V \frac{\chi(\boldsymbol{r}')E(\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}k\,|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|)}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right) \tag{12.3.3}$$

假定晶体在入射场的作用下极化很小，上式右边的电场采用 Born 近似 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')\approx \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}')$，于是

$$\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) \approx \frac{1}{4\pi}\nabla\times\left(\nabla\times\int_V \frac{\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}_0\exp[\mathrm{i}(k\,|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|+\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')]}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right) \tag{12.3.4}$$

作远场近似：$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx|\boldsymbol{r}|-\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{r}'$，上式进一步近似为

$$\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{1}{4\pi}\frac{\exp(\mathrm{i}k\,|\,\boldsymbol{r}\,|)}{|\,\boldsymbol{r}\,|}\boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_0)\int_V \chi(\boldsymbol{r}')\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.3.5}$$

式中 $\boldsymbol{q}=k\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{k}$ 是入射波与散射波波矢量之差. 把式(12.3.1)代入上式

$$\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\exp(\mathrm{i}k\,|\,\boldsymbol{r}\,|)}{|\,\boldsymbol{r}\,|}\boldsymbol{k}\times(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}_0)\sum_G \chi_G\int_V \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{r}']\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{12.3.6}$$

注意到上式中积分遍及整个晶体，一般为零. 除非 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{q}$. 设入射波波矢与散射波波矢的夹角为 ϑ(如图 12.3.1)，即有

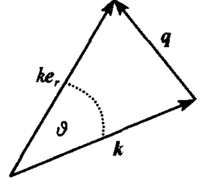


图 12.3.1 入射波与散射波波矢量之差

$$|\,k\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{k}\,| = 2k\sin\frac{\vartheta}{2} \tag{12.3.7}$$

方程 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{q}$ 变成 $2k\sin(\vartheta/2)=G$. 如果晶面之间距离为 d，则 $G=2\pi m/d$

$$2d\sin\frac{\vartheta}{2} = m\lambda \tag{12.3.8}$$

其中 $m=\pm1,\pm2,\cdots$. 上式称为 Bragg 方程. 当入射波波长满足 Bragg 方程时，衍射波极大.

光子晶体：下面讨论宏观周期结构对电磁波的散射. 假定周期介质的构成为：基底和嵌入体且嵌入体周期排列，基底和嵌入体的介电常量不同且有较大的反差.

这样的宏观周期结构与自然晶体的周期结构有一个很大的区别：自然晶体中介电常量虽然是周期性的，但周期调制度很小(大约只有 10^{-4}). 而在宏观周期结构中，基底和嵌入体材料是人为选择的，可以有较大的差别，一般可达到一个数量级的介电常量比率，故 Born 近似已不成立. 这样的宏观周期结构称为**光子晶体**. 下面我们来分析电磁波在光子晶体中的传播特性.

设基底和嵌入体材料都是非磁性介质 $\mu \approx \mu_0$，介电常量是空间的周期函数 $\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_0 \varepsilon_r(\boldsymbol{r})$，由介质中的 Maxwell 方程组，可以得到电场满足的方程

$$\nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{E}) - \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E} = 0 \tag{12.3.9}$$

利用矢量运算，上式即为

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} - \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{E}) + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E} = 0 \tag{12.3.10}$$

注意：上式左边第二项现在不为零. 考虑特殊的二维周期结构，如图 12.3.2：嵌入体为无限长柱体，电磁波在垂直于柱体的平面(设为 xOy 平面)内传播，电场矢量的极化方向平行于柱体(设为 z 方向)，那么矢量方程变成标量方程

$$\nabla^2 E_z + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon(x,y)E_z = 0 \tag{12.3.11}$$

图 12.3.2　二维周期结构

由周期性，介电常量可展成 Fourier 级数

$$\varepsilon(x,y) = \sum_{m,n}^{\infty}\varepsilon_{mn}\exp\left[2\pi \mathrm{i}\left(\frac{m}{a}x + \frac{n}{b}y\right)\right] = \sum_{G}\varepsilon_G \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{12.3.12}$$

其中(a,b)为嵌入体的周期，$\boldsymbol{G}$ 为倒格矢

$$\boldsymbol{G} = 2\pi\left(\frac{m}{a},\frac{n}{b}\right) \quad (m,n = 0,\pm 1,\pm 2,\cdots) \tag{12.3.13}$$

由 Bloch 定理，电场也可展开成

$$E_z(x,y) = \sum_{G} E_G(\boldsymbol{k},\boldsymbol{G})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}] \tag{12.3.14}$$

代入方程(12.3.11)得到

$$\sum_{G} |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}|^2 E_G \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}] - \frac{\omega^2}{c^2}\sum_{G'}\sum_{G}\varepsilon_G(\boldsymbol{G})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}+\boldsymbol{G}')\cdot\boldsymbol{r}]E_{G'} = 0$$

上式第二项令求和指标令为 $\boldsymbol{G}'' = \boldsymbol{G}' + \boldsymbol{G}$，然后再把 $\boldsymbol{G}''$ 改为 $\boldsymbol{G}$，即得到

$$\sum_{G}\left[\,|\,\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}\,|^2E_G-\frac{\omega^2}{c^2}\sum_{G'}\varepsilon_G(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')E_{G'}\right]\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{r}]=0$$

由 Fourier 变换的正交性

$$|\,\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}\,|^2E_G-\frac{\omega^2}{c^2}\sum_{G'}\varepsilon_G(\boldsymbol{G}-\boldsymbol{G}')E_{G'}=0 \tag{12.3.15}$$

上式为无穷联立的线性方程组，一般作切断近似，求和从$(-N)$到$(+N)$，上式简化为 $4N^2$ 个联立的线性方程组，存在非零解的条件为系数行列式等于零. 于是可得到决定色散关系的方程 $\omega=\omega(\boldsymbol{k})$. 数值计算表明，当两种介质的介电常量相差足够大，且周期(a,b)满足一定条件时，色散曲线上存在禁带，就像自然晶体中的电子能带一样，频率位于禁带内的电磁波不能通过周期介质. 禁带的产生是由于电磁波的相干散射形成的，这一结论与第 3 章的声子晶体类似. 事实上，这是波动的基本特性.

12.4 经典电动力学的适用范围和电子的惯性结构

Maxwell 电磁理论成功描述了宏观系统的电磁场和电磁波的基本性质和运动规律. 但是运用这一宏观理论研究微观粒子的行为时遇到严重的困难，这不仅仅是因为没有考虑到微观粒子和电磁波的波-粒二象性（见第 19 章讨论），更是因为经典电动力学存在内在的矛盾. 这些矛盾主要是由如何描述电子而引起的，但电子是 Maxwell 电磁理论中的一个基本粒子，经典电动力学是建立在点电荷模型的基础之上的. 如果把电子看成一个几何点的话将导致什么问题呢?

电子固有能和质量发散问题：设电子的电荷均匀分布在半径为 R 的球面上，则其电场为

$$\boldsymbol{E}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e}{r^3}\boldsymbol{r} \tag{12.4.1}$$

因此电子作为一个带电体的固有能量为

$$\begin{aligned}W&=\frac{\varepsilon_0}{2}\int E^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{32\pi^2\varepsilon_0}\int\frac{e^2}{r^4}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&=\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\int_R^\infty\frac{e^2}{r^2}\mathrm{d}r=\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{R}\end{aligned} \tag{12.4.2}$$

对点电荷，$R\to0$，$W\to\infty$. 也就是说，在一个点电荷周围存在着无穷大的能量，即电子的固有能为无穷大. 当然我们可以认为无穷大的固有能在物理上没有可观测的效应，但是由 $E=mc^2$，无穷大的能量对应于无穷大的质量，而质量是物理上可观察量. 目前已精确地测定电子的静止质量为 $m_0=9.11\times10^{-28}\,\mathrm{g}$，可见电子具有无穷大的固有能是不可能的.

一方面，电动力学的相对论协变性要求电子是一个点电荷，而另一方面，点电荷模型又导致无穷大的固有能. 因此我们很自然地得出一个结论：将经典电动力学应用于充分小的空间尺度时出现了自相矛盾的结果. 显然，这个矛盾是电动力学的内在矛盾！实验已测定电子的静止质量 m_0，故电子的固有能应该与 m_0c^2 同数量级，即

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{R}\approx m_0c^2 \tag{12.4.3}$$

于是电子的经典半径大致为

$$R\approx\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_0c^2}\equiv r_e \tag{12.4.4}$$

它决定了经典电动力学的适用范围，即 Maxwell 理论的适用界限

$$r\gg\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_0c^2}=r_e \tag{12.4.5}$$

其中 m_0 是实测的电子质量. 经典电动力学出现内在矛盾的根源在于电子的质量问题，如果认为电子质量可表示为惯性质量 m 和电磁质量 W/c^2 之和

$$m_0=m+\frac{W}{c^2} \tag{12.4.6}$$

那么实验中测量的电子质量只能是惯性质量和电磁质量之和. 实验证明电磁质量是确实存在的，这一点可由中子与质子质量的微小差别看出.

电子的自我加速问题：电子在外场作用下，一方面作加速运动而辐射电磁波，另一方面由能量守恒性，电子将受到辐射阻尼力的反作用，电子的运动方程为

$$m_0\dot{\boldsymbol{v}}=e\boldsymbol{E}+e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\boldsymbol{v}} \tag{12.4.7}$$

如果电子运动到某一位置时，撤去外电场和外磁场，则电子的运动方程为

$$m_0\dot{\boldsymbol{v}}=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\boldsymbol{v}} \tag{12.4.8}$$

这个方程有二个解，一个是平庸解 $\boldsymbol{v}=$常量，另一个是“奔离”解

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_0\exp\left(4\pi\varepsilon_0\frac{8m_0c^3}{2e^2}t\right) \tag{12.4.9}$$

这意味着：一旦撤去外场，电子将无限制地“自我加速”. 显然这是不可能的. 唯一的可能是：当撤去外场时，方程(12.4.7)已不成立，当辐射阻尼力远小于外力时，即

$$|e\boldsymbol{E}+e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}|\gg\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^2}{3c^3}|\ddot{\boldsymbol{v}}| \tag{12.4.10}$$

时，可以把方程(12.4.7)右边的最后一项当作微扰，并且两边求导得到

$$\ddot{\boldsymbol{v}}\approx\frac{e}{m_0}(\dot{\boldsymbol{E}}+\dot{\boldsymbol{v}}\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{v}\times\dot{\boldsymbol{B}}) \tag{12.4.11}$$

对平面单色电磁波$|\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{E}|/c$，$\dot{\boldsymbol{v}}\approx e\boldsymbol{E}/m_0$，$\dot{\boldsymbol{E}}\approx\omega\boldsymbol{E}$，同时略去 v/c 项，上式变成

$$\ddot{\boldsymbol{v}}\approx\frac{e\omega}{m_0}\boldsymbol{E}+\frac{e^2}{m_0^2}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B} \tag{12.4.12}$$

故辐射阻尼力近似为

$$\boldsymbol{F}_r\approx\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{2e^3\omega}{3m_0c^3}\boldsymbol{E}+\frac{2e^4}{3m_0^2c^3}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}\right] \tag{12.4.13}$$

把上式的两项分别与外力比较，我们要求

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^3\omega}{3m_0c^3}\,|\boldsymbol{E}|\ll e\,|\boldsymbol{E}|;\quad \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2e^4}{3m_0^2c^3}\,|\boldsymbol{E}|\cdot|\boldsymbol{B}|\ll e\,|\boldsymbol{E}| \tag{12.4.14}$$

即要求

$$\lambda\gg\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{m_0c^2};\quad |\boldsymbol{B}|\ll4\pi\varepsilon_0\frac{m_0^2c^3}{e^3} \tag{12.4.15}$$

第一式意味着只有当辐射电磁波的波长远大于电子的经典半径 r_e 时，辐射阻尼力公式才成立. 可见经典电子半径 r_e 是经典电动力学适用的一个界限. 另一方面，由第二式，对电磁场的场强也存在限制.

综上所述，Maxwell 电磁理论只有在空间尺度、辐射波长和磁感强度满足不等式(12.4.5)和(12.4.15)才适用.

电子的惯性结构：考虑匀速运动(以速度 v 在 x 轴方向)的电子，在电子静止的 S'参考系中，磁场 $\boldsymbol{B}'=0$，电场 $\boldsymbol{E}'$由式(12.4.1)决定. 能量-动量张量为

$$[G'_{\sigma\lambda}]=\begin{bmatrix}-T'_{11} & -T'_{12} & -T'_{13} & 0\\ -T'_{21} & -T'_{22} & -T'_{23} & 0\\ -T'_{31} & -T'_{32} & -T'_{33} & 0\\ 0 & 0 & 0 & u'\end{bmatrix} \tag{12.4.16}$$

其中 u'为电子静止参考系内的能量密度 $u'=\varepsilon_0\boldsymbol{E}'^2/2$，由定义式(7.4.16)：$T'_{11}\neq0$，$T'_{44}\neq0$. 因为 $G_{\sigma\lambda}$ 是张量，变换关系为 $G_{\sigma\lambda}=a_{\sigma\nu}a_{\lambda\tau}G'_{\nu\tau}$，可以得到以速度 v 运动的参考系 S 内，电子的能量-动量张量为

$$G_{14}=\frac{\mathrm{i}\beta(G'_{44}-G'_{11})}{1-\beta^2};\quad G_{44}=\frac{G'_{44}-\beta^2G'_{11}}{1-\beta^2}$$
$$G_{24}=G_{34}=G_{42}=G_{43}=0 \tag{12.4.17}$$

因此在 S 系中电磁场的总动量和总能量分别为

$$G_i=\frac{\mathrm{i}}{c}\int G_{i4}\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3\quad(i=1,2,3)$$
$$W=\int G_{44}\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3 \tag{12.4.18}$$

注意到 $\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}x_3=\sqrt{1-\beta^2}\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3$，在静止参考系内积分

$$\begin{aligned}G_1&=-\frac{v}{c^2}\int\frac{(G'_{44}-G'_{11})}{\sqrt{1-\beta^2}}\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3,\quad G_2=G_3=0\\W&=\int\frac{(G'_{44}-\beta^2G'_{11})}{\sqrt{1-\beta^2}}\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3\end{aligned}\tag{12.4.19}$$

因

$$\int G'_{44}\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3=\frac{\varepsilon_0}{2}\int E'^2\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3\equiv W_0\tag{12.4.20}$$

$$\int G'_{11}\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3=-\varepsilon_0\int\left(\frac{1}{2}E'^2-E'^2_x\right)\mathrm{d}x'_1\mathrm{d}x'_2\mathrm{d}x'_3=-\frac{1}{3}W_0\tag{12.4.21}$$

(12.4.20)和(12.4.21)式代入方程(12.4.19)得到

$$G_1=-\frac{4v}{3c^2}\frac{W_0}{\sqrt{1-\beta^2}};\quad W=\frac{W_0}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(1+\frac{1}{3}\beta^2\right)\tag{12.4.22}$$

把电子的电磁动量、能量与电子的运动动量、能量

$$P_\sigma=\left(\frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}},\frac{\mathrm{i}m_0c}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)=\left(\frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\beta^2}},\frac{\mathrm{i}E}{c}\right)\tag{12.4.23}$$

比较，显然 G_1 和 W 不可能构成一个四维矢量. 因此不能把电子的力学性质完全归结为电磁场的动量和能量. 另一方面，从场的观点，可以用三种方法定义电子的电磁质量

1. 电磁动量与运动速度之比

$$m_{\mathrm{em}}=\frac{G_1}{v}=\frac{4}{3}\frac{W_0/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\tag{12.4.24}$$

2. 把 W 看成匀速运动电子的固有能量，由质能关系

$$m_{\mathrm{em}}=\frac{W_0/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\left(1+\frac{1}{3}\beta^2\right)\tag{12.4.25}$$

3. 把静止参考系内的固有能量 W_0 除以 c^2 得到电子的静止质量，然后由相对论质量变换公式得到

$$m_{\mathrm{em}}=\frac{W_0/c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\tag{12.4.26}$$

因此，用三种方法可以定义完全不同的电磁质量. 可见在经典电动力学范围内不可能彼此协调地引入电子质量和动量.

习 题 12

12.1 半径为 a 的理想导体小球,被平面单色电磁波照射,求散射截面与电磁波频率和半径 a 的比例关系.(提示:$\lambda \gg a$,在导体小球附近,电磁波可看作是均匀的.在垂直于电磁波传播方向的两面将产生感应电荷,感应电荷等效于一个电偶极子 $\boldsymbol{p}=4\pi\varepsilon_0 a^3 \boldsymbol{E}_0 \exp(-\mathrm{i}\omega t)$)

答案:$\sigma \sim \omega^4 a^6 / c^4$.

12.2 介电常量为 ε、半径为 a 的电介质小球,被平面单色电磁波照射.求散射截面与电磁波频率和半径 a 的比例关系.(提示:$\lambda \gg a$,在介质小球附近,电磁波可看作是均匀的,在电磁波的极化下,将产生极化面电荷,等效于一个电偶极子

$\boldsymbol{p}=4\pi\varepsilon_0 a^3 \dfrac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}\boldsymbol{E}_0 \exp(-\mathrm{i}\omega t)$)

答案:$\sigma \sim \dfrac{\omega^4 a^6}{c^4}\left(\dfrac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}\right)^2$.

12.3 半径为 a、高为 h 的电介质小圆柱,介电常量为 ε,被平面单色电磁波照射,设入射波波矢量与圆柱轴垂直,电场偏振方向与圆柱轴平行,并且 $a \ll h \ll \lambda$.求散射截面与电磁波频率、半径 a 和高度 h 的比例关系.(提示:由于 $a \ll h \ll \lambda$,在介质小圆柱附近,电磁波可看作是均匀的.在电磁波的极化下,将产生极化电荷,等效于一个电偶极子.对圆柱侧面,由电场切向分量的连续性,可近似认为柱内的电场与入射电场的偏振方向相同.小柱体的电偶极矩为 $\boldsymbol{p}=\pi a^2 h\left(\dfrac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon_0}\right)E_0 \exp(-\mathrm{i}\omega t)\boldsymbol{e}_z$)

答案:$\sigma \sim h^2\left(\dfrac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon_0}\right)^2 \dfrac{\omega^4 a^4}{c^4}$.

12.4 一椭圆偏振的平面电磁波被一个自由电荷散射,求散射截面.(提示:设电磁波传播方向为 z 方向,则电场矢量在 xOy 平面内,椭圆偏振表示成

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{e}_1 E_1 \cos\omega t + \boldsymbol{e}_2 E_2 \sin\omega t)$$

答案:$\boldsymbol{E}_\mathrm{s} = -\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^2}\dfrac{e}{|\boldsymbol{r}|}[\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{e}_r \times \ddot{\boldsymbol{\xi}}]$;$\boldsymbol{B}_\mathrm{s} = \dfrac{1}{c}\boldsymbol{e}_r \times \boldsymbol{E}_\mathrm{s}$;散射角分布

$$f(\vartheta,\varphi)=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 mc^2}\right)^2 \frac{E_1^2(\boldsymbol{e}_1 \cdot \boldsymbol{e}_r)^2+E_2^2(\boldsymbol{e}_2 \cdot \boldsymbol{e}_r)^2}{E_1^2+E_2^2}.$$

12.5 电荷为 e,质量为 m 的电子被电荷为 Ze 重核的 Coulomb 场所散射.设电子的初速度为 $v_0 \ll c$,瞄准距离为 b,求电子在散射过程中辐射的能量.瞄准距离 b 定义为:电子入射线到核所在的平行线的距离.

（提示：

$$m\dot{\boldsymbol{v}}=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\boldsymbol{r}$$

于是辐射总能量为

$$\Delta E=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^2\dot{\boldsymbol{v}}^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\mathrm{d}t=\int\frac{e^2\dot{\boldsymbol{v}}^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\vartheta}\mathrm{d}\vartheta$$

注意利用角动量守恒定律：$mr^2\dot{\vartheta}=mv_0b$）



第三部分

量子力学

第 13 章　微观粒子的运动规律

在前面各章以及第 19 章至 24 章中，我们主要介绍所谓的经典物理学，即经典力学(包括牛顿力学、Lagrange 力学和 Hamilton 力学)、宏观电磁场理论以及经典统计(热)力学. 这些理论在 20 世纪前已经构成了一个相当完善的理论体系. 随着技术的进步和人们认识水平的不断提高，科学家们发现了用经典物理学无法解释的一些新现象. 这些现象主要有：①与光(即电磁波)有关，如黑体辐射、光电效应、原子的线状光谱和 Compton 散射等；②与电子的运动有关，如原子(核和核外电子)的稳定性问题；③与热现象有关，如固体的比热. 这些现象用经典物理是无法解释的. 1900 年，Planck 首先提出了能量量子化的假设，成功解释了黑体辐射；1905 年，Einstein 提出光子学说，圆满地解释了光电效应；1907 年，Einstein 又把能量量子化的概念运用于固体原子的振动，证明了当温度趋于 0K 时，固体比热趋于零这个实验结果；1924 年，de Broglie 受到光的波-粒二象性启发，提出实物粒子(电子、质子、中子等微观粒子)也有波动特性假设，并得到了实验证明.

本章至第 18 章介绍的微观粒子(所谓微观粒子就是 Planck 常量在描述其运动规律时起着决定性作用的粒子)的运动规律，与经典的宏观物理有一个根本的区别，即能量的量子化.

13.1　波函数的统计解释和 Schrödinger 方程

在经典物理学中，粒子和波是完全不同的两个概念. 前者是空间定域的，它的运动规律由经典力学控制，描述方法是它的空间位置和动量(或者速度)，即具有一定的运动轨道；而后者是空间弥散的，电磁波的运动规律由经典电磁场理论(即 Maxwell 方程组)控制，描述方法为电场和磁场在空间的分布. 光的干涉和衍射现象毫无疑问表明了光的波动特性. 但光电效应和 Compton 散射等实验结果显示，光的行为又像粒子(具有确定的动量和能量). 到底光是波还是粒子？我们来分析 Young 双缝干涉实验.

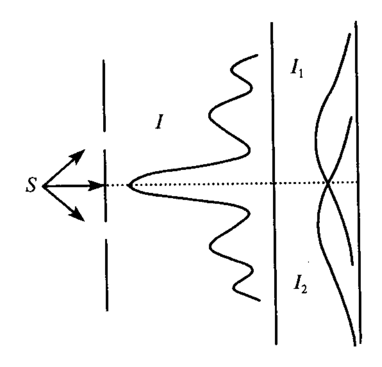


图 13.1.1　Young 双缝干涉

如图 13.1.1，当关闭缝 1 或缝 2 时，分别得到屏上的衍射图 I_1 和 I_2，当缝 1 和缝 2 同时打开时，屏上的光强度 $I\neq I_1+I_2$，具有明显的干涉图样. 因

此干涉是波的基本特征;但是近代的实验发现:当光的强度减少到足够弱时,屏上开始时出现的是一个个无规则分布的感光点,这说明光具有粒子性,光强度足够弱意味着可近似认为只有一个光子发射.当感光时间足够长,屏上原来无规则分布的感光点经大量积累光子后又出现有规则的干涉图样,说明光又具有波动的统计特征.

这一结果表明:光具有波与粒子的两重性质,称为**波-粒二象性**.光的波动性和粒子性二者是不可分割的.那么如何统一描述光的这种波动性和粒子性呢?我们可以用一个波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述光子在某一时刻的行为,$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 给出光子在 t 时刻、在 $\boldsymbol{r}$ 处出现的概率振幅.这样,波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 就统一了光的波动和粒子二重性.但必须指出:光子是静止质量为零的相对论粒子,其运动规律由量子电动力学讨论,本书不涉及这方面的内容,仅考虑静止质量不为零且低速运动的非相对论微观粒子的运动规律.

人们长期认为的光波具有粒子性,那么长期认为的粒子(如电子、中子和质子等)是否也有波动性呢?1924年,de Broglie 提出实物粒子的波-粒二象性:如果实物粒子的动量为 $\boldsymbol{p}$,能量为 $\boldsymbol{E}$,则它对应波的波矢 $\boldsymbol{k}$ 和频率 ν(或角频率 ω)分别为

$$E = h\nu = \hbar\omega; \quad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \tag{13.1.1}$$

其中 $\hbar$ 称为约化 Planck 常量.1927年,Davison-Germer 用单晶体电子衍射实验证实了 de Broglie 的假设.因此,波与粒子这两个在经典物理学中完全不同的概念,在微观粒子中得到了统一.

如前所说,Planck 用能量量子化的假设成功解释了黑体辐射,黑体发射与吸收电磁波的能量方式是不连续的(而经典物理中能量是连续变化的),只能取最小能量单位 $\varepsilon=\hbar\omega$(其中 ω 是电磁波的角频率)的整数倍.可见,通过约化 Planck 常量,能量量子化与波-粒二象性紧密联系在一起了,或者说,量子化与波-粒二象性有着深刻的联系.事实上,我们将看到量子化是波-粒二象性的必然结果.电子和其他微观粒子的主要特点是能量量子化和波动特性,故描述它们的运动规律叫**量子力学或波动力学**.

与经典力学完全不同,电子和其他微观粒子的运动用波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述,$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 给出了微观粒子在 t 时刻、在 $\boldsymbol{r}$ 处出现的概率振幅.这样波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 就统一了微观粒子的粒子与波动二重性.$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 描述了微观粒子的运动状态,称为**量子态**.

为了进一步阐明波函数的意义,我们来看自由粒子的波函数.对自由粒子,粒子的能量 E 和动量 $\boldsymbol{p}$ 一定,由关系式(13.1.1),波的频率与波矢量一定的波为平面波,即

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_0 \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)] = \psi_0 \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)\right] \tag{13.1.2}$$

显然 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 充满全空间,自由粒子占据整个空间当然是不可能的.事实上,由于

$|\psi(\boldsymbol{r},t)|=|\psi_0|$($\psi_0$为常数),如果把$\psi(\boldsymbol{r},t)$充满全空间这个事实解释为:在空间的任意一点找到自由粒子的概率为常数,这样问题就解决.类似地,对非自由粒子,波函数$\psi(\boldsymbol{r},t)$的统计解释为:

1. $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$给出了微观粒子在$t$时刻,粒子在$\boldsymbol{r}$处出现的概率密度;

2. 微观粒子的力学量$f(\boldsymbol{r})$的统计平均值为

$$\langle f\rangle=\frac{\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)f(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}{\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}\tag{13.1.3}$$

注意:量子态$\psi(\boldsymbol{r},t)$本身不是任何力学量,我们还必须借助经典力学中广义坐标、广义动量的概念.但在量子态$\psi(\boldsymbol{r},t)$中,只能给出这些物理量的统计平均值;

3. 由于微观粒子在t时刻,粒子在$\boldsymbol{r}$处出现的概率应该是单值的,故$\psi(\boldsymbol{r},t)$应该是单值、有界的连续函数(除个别孤立奇点外);

4. $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$给出了概率密度,而与$\psi(\boldsymbol{r},t)$的相位没有关系,但越来越多的物理事实表明波函数的相位非常重要,但本书对此不进行深入的讨论;

5. 对N个微观粒子组成的体系,设量子态为$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)$,那么$|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)|^2$表示$t$时刻第一个粒子在$\boldsymbol{r}_1$处,第二个粒子在$\boldsymbol{r}_2$处,…,第$N$个粒子在$\boldsymbol{r}_N$处出现的概率密度.

叠加原理:对经典波而言,干涉和衍射现象是波叠加的结果.对微观粒子,干涉和衍射应该是概率波的叠加.下面给出量子力学中的一条基本原理,即叠加原理:如果$\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n$是体系可能的状态,则它们的线性叠加

$$\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2+\cdots+c_n\psi_n=\sum_{i=1}^{n}c_i\psi_i\tag{13.1.4}$$

也是体系的一个可能状态;如果当体系处在$\psi_i(i=1,2,\cdots)$态时,测量某力学量A得出的准确值为$a_i(i=1,2,\cdots)$,那么当系统处在量子态ψ时,测量力学量A得到$a_i(i=1,2,\cdots)$的概率为

$$P_i=|c_i|^2/\sum_{k=1}^{n}|c_k|^2\tag{13.1.5}$$

那么,描述微观体系运动状态的波函数ψ随时间t演化满足什么样的方程呢?显然物理上要求:

1. 由于波函数满足叠加原理,描写波函数ψ随时间演化的方程必然是线性方程;

2. 方程的系数仅含有诸如质量m、电荷e等粒子内禀物理量,不应该含有与个别粒子运动状态的特定性质有关的量,如坐标、动量等;特别是,方程的系数必须含有约化Planck常量,以表征这一方程确是描述约化Planck常量起作用的微观世界中粒子的运动;

3. 波函数 ψ 是时间和空间的函数，故波函数满足的方程必然是偏微分方程，我们要求关于时间是一阶的，因为根据 ψ 的意义，初始条件 $\psi(\boldsymbol{r},t)|_{t=0}=\psi(\boldsymbol{r},0)$ 一旦给定，方程能唯一确定以后随时间的演化. 如果关于时间是二阶的，那么初始条件还必须给出时间的一阶导数，而这个初始条件没有物理意义. 另一方面，波函数关于空间应该不高于二阶导数，这样一旦给定边界条件，方程的解能唯一决定；

4. 由于经典力学是量子力学的极限情况，当 $\hbar\to 0$ 时，这个方程应该过渡到牛顿方程；

5. 对自由粒子，方程的解应该是式(13.1.2).

当然，仅靠这些条件不可能构造波函数满足的方程. 上面的条件只为建立方程提供了一些必要条件而已. 通过演绎和推广，我们来构造波函数满足的方程. 由式(13.1.2)，两边分别对时间和空间求微分得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=E\psi(\boldsymbol{r},t);\quad -\hbar^2\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)=p^2\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{13.1.6}$$

在非相对论情况 $E=p^2/2m$，因此上式变成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{13.1.7}$$

由方程(13.1.6)可看出：能量和动量作用在波函数上的结果与用算符 $\mathrm{i}\hbar\partial/\partial t$ 及 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 作用在波函数上的结果相同，即存在对应关系

$$E\to\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t};\quad \boldsymbol{p}\to-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{13.1.8}$$

1926 年，Schrödinger 推广上述关系至一般情况，建立了描述波函数演化规律的 Schrödinger 方程. 设单粒子体系的 Hamilton 函数为

$$H=\frac{p^2}{2m}+U(\boldsymbol{r},t) \tag{13.1.9}$$

其中 $U(\boldsymbol{r},t)$ 为势函数，根据规则(13.1.8)，在有势函数作用时，方程(13.1.7)推广为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+U(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{13.1.10}$$

上式称为 **Schrödinger 方程**. 对 N 个粒子组成的多粒子体系，Hamilton 函数为

$$H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m_i}+U(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t) \tag{13.1.11}$$

其中 $U(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)$ 包括粒子的相互作用势，Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2\psi+U\psi \tag{13.1.12}$$

显然 Schrödinger 方程满足必要条件 1、2、3 和 5，至于必要条件 4，可以证明当 $\hbar\to 0$ 时，Schrödinger 方程也满足. 必须指出：牛顿力学方程或 Maxwell 方程组是

建立在坚实的实验基础上的，而 Schrödinger 方程是通过演绎和推广而得到的. 因此说，**Schrödinger 方程是量子力学的基本假定之一.**

与牛顿力学方程不同，概率流守恒定律自动包含在 Schrödinger 方程中，而在经典力学中，牛顿力学方程和连续性方程是两个独立的方程. 由于波函数的统计解释，$\rho(\boldsymbol{r},t)=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 代表 t 时刻、粒子处于 $\boldsymbol{r}$ 的概率密度，于是

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \tag{13.1.13}$$

由方程(13.1.10)

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\equiv-\nabla\cdot\boldsymbol{J} \tag{13.1.14}$$

即存在概率流守恒定律

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{J}=0 \tag{13.1.15}$$

其中 $\boldsymbol{J}$ 称为**概率流密度矢量**

$$\boldsymbol{J}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*) \tag{13.1.16}$$

当 $U(\boldsymbol{r},t)$ 与时间无关时：$U(\boldsymbol{r},t)=U(\boldsymbol{r})$，Schrödinger 方程(13.1.10)可分离变量，令

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})f(t) \tag{13.1.17}$$

代入方程(13.1.10)得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}=Ef;\quad\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{13.1.18}$$

其中 E 为分离变量常数，上式第一个方程的解为

$$f(t)=f_0\exp\left(-\frac{\mathrm{i}Et}{\hbar}\right) \tag{13.1.19}$$

因此这时概率密度 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ 与时间无关，称系统处于**定态**. 由方程(13.1.18)第二式，定义粒子的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{r}) \tag{13.1.20}$$

那么方程(13.1.18)第二式可写成 Hamilton 算符的本征方程形式

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{13.1.21}$$

分离变量常数 E 即为能量的本征值. 因此，定态 Schrödinger 方程就是能量的本征方程.

例 13.1.1　一维无限深势阱中的微观粒子.

解：　势函数为

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant a \\ \infty, & x < 0, \quad x > a \end{cases} \tag{13.1.22}$$

定态 Schrödinger 方程和边界条件为

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} &= E\psi, \quad 0 < x < a \\ \psi &= 0, \quad x \leqslant 0, \quad x \geqslant a \end{aligned} \tag{13.1.23}$$

令 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$,上式中第一个方程变为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad 0 < x < a \tag{13.1.24}$$

上式的通解为

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{13.1.25}$$

由方程(13.1.23)第二式边界条件 $\psi(0)=\psi(a)=0$ 得到

$$B \equiv 0; \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1,2,\cdots) \tag{13.1.26}$$

所以

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \equiv E_n \tag{13.1.27}$$

能量最小的量子态称为**基态**,相应的能量称为**基态能量**,即为

$$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \tag{13.1.28}$$

与能量本征值 E_n 相应的归一化本征函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{13.1.29}$$

而在经典力学中,粒子的能量 $E=p^2/(2m)$ 可以从零到无限大连续变化.

13.2 一维定态问题:隧道效应和共振透射

一维定态问题,即求解定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi \tag{13.2.1}$$

根据解的性质,问题分为两类:①给定 $U(x)$ 和 ψ 满足的边界条件,求束缚态波函数 $\psi=\psi_n$ 以及相应的能量本征值 $E=E_n$. 所谓**束缚态**,就是粒子被势能定域在势函数附近,波函数在 $x\to\pm\infty$ 指数衰减:$\psi(x)\sim\exp(-|x|)$,$x\to\pm\infty$;②给定粒子的能量 E、$U(x)$ 和 ψ 满足的边界条件,求粒子被作用势的散射,称粒子处于**散射态**,波函数在 $x\to\pm\infty$ 为有限值.

由于一维定态 Schrödinger 方程(13.2.1)是一维 Hamilton 算符的本征方程,

而一维 Hamilton 算符是 Hermite 算符，因此它具有 Hermite 算符的所有性质（见下章讨论）. 这里介绍一维情形特有的性质.

1. 如果势函数无奇性，一个能量本征值 E_n 只存在一个波函数 ψ_n，即无简并（见下章讨论）：设存在两个波函数 ψ_1 和 ψ_2，如果势函数无奇性

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1}=-\frac{2m}{\hbar^2}[E_n-U(x)]=\frac{\psi_2''}{\psi_2} \tag{13.2.2}$$

即

$$\psi_2\psi_1''-\psi_1\psi_2''=(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')'=0 \tag{13.2.3}$$

故 $(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')=c$（$c$ 为常数）. 对束缚态 $\psi_1|_{x\to\pm\infty}=\psi_2|_{x\to\pm\infty}$，所以 $c=0$. 于是有

$$\left[\ln\left(\frac{\psi_1}{\psi_2}\right)\right]'=0 \tag{13.2.4}$$

因此 $\psi_1=C\psi_2$，波函数只差一个常数，如果波函数 ψ_1 和 ψ_2 都是归一化的，则 $|C|^2=1$，即 $C=\exp(\mathrm{i}\delta)$，而在非相对论量子力学中，相位具有不确定性，可以取 $\delta=0$.

2. 一维束缚态波函数可取为实数：由于势函数是实数，如果 ψ 是方程(13.2.1)的解，那么 ψ^* 也是方程(13.2.1)的解，至多差一个常数，即 $\psi^*=C\psi$. 该式两边求复共轭得到

$$\psi=C^*\psi^*=C^*C\psi=|C|^2\psi \tag{13.2.5}$$

故常数 $C=\exp(\mathrm{i}\delta)$，同性质 1 相同理由，可以取 $\delta=0$.

3. 解在无限远处的性质：设

$$\lim_{x\to\pm\infty}U(x)=U_0 \tag{13.2.6}$$

方程(13.2.1)的渐近形式为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi=0,\quad x\to\pm\infty \tag{13.2.7}$$

如果 $E>U_0$，无限远处解振荡，表示散射态；如果 $E<U_0$，无限远处解指数衰减，表示束缚态. 一个特殊例子是 $U_0=0$，则束缚态 $E<0$.

例 13.2.1　一维有限深势阱中的微观粒子.

解：　势函数为

$$U(x)=\begin{cases}-U_0, & |x|\leqslant a\\ 0, & |x|>a\end{cases} \tag{13.2.8}$$

定态 Schrödinger 方程

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-U_0\psi=E\psi,\quad |x|<a\\&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=E\psi,\quad |x|>a\end{aligned} \tag{13.2.9}$$

令 $k=\sqrt{2m(U_0+E)/\hbar^2}$，$\alpha=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$，上式变为

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+k^2\psi=0,\quad |x|<a\\&\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\alpha^2\psi=0,\quad |x|>a\end{aligned}\tag{13.2.10}$$

当 $E<0$ 时，在 $x\to\pm\infty$ 波函数指数衰减，粒子束缚在势阱中，我们考虑这种情况. 上式的通解为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\exp(\alpha x), & -\infty<x<-a\\ B\cos kx+C\sin kx, & |x|<a\\ D\exp(-\alpha x), & a<x<+\infty\end{cases}\tag{13.2.11}$$

诸系数由 $x=\pm a$ 处的边界条件决定，即在 $x=\pm a$ 处，ψ 和 ψ' 连续. 注意：ψ 的连续是物理要求（波函数连续），而 ψ' 的连续是数学要求，因为如果 ψ' 不连续，ψ'' 将出现 δ 函数. 于是

$$\begin{aligned}B\cos ka-C\sin ka&=A\exp(-\alpha a)\\ kB\sin ka+kC\cos ka&=\alpha A\exp(-\alpha a)\\ B\cos ka+C\sin ka&=D\exp(-\alpha a)\\ kB\sin ka-kC\cos ka&=\alpha D\exp(-\alpha a)\end{aligned}\tag{13.2.12}$$

上式为关于 A、B、C 和 D 的齐次方程，存在非零解的条件为系数行列式等于零，从而可以求出决定能量本征值 E 的方程. 采用比较简单的方法：(13.2.12)式第一个方程除以第二个方程、第三个方程除以第四个方程，分别得到关于 B 和 C 的齐次方程，然后令系数行列式为零得到决定能量本征值 E 的两个方程

$$k\tan ka=\alpha;\quad k+\alpha\tan ka=0\tag{13.2.13}$$

注意到 $k=\sqrt{2m(U_0+E)/\hbar^2}$，$\alpha=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$，(13.2.13)式为 E 的超越方程，可用图解法解之. 令 $\xi=ka$；$\eta=\alpha a$，则

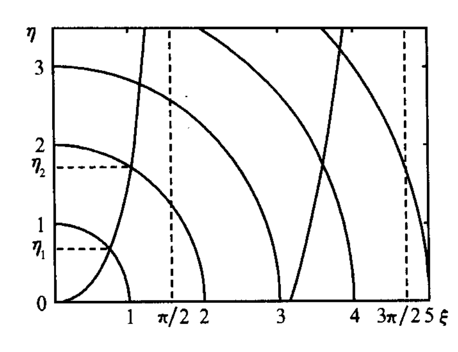
$$\xi^2+\eta^2=\frac{2m}{\hbar^2}U_0a^2\tag{13.2.14}$$

显然，上式表示 (ξ,η) 平面上的 1/4 圆（在第一象限）. 另一方面，由方程(13.2.13)得到

$$\eta=\xi\tan\xi;\quad \eta=-\xi\cot\xi\tag{13.2.15}$$

为 (ξ,η) 的诸曲线，如图 13.2.1：左、右分别为 $\eta=\xi\tan\xi$ 和 $\eta=-\xi\cot\xi$. 圆与诸曲线的交点 (ξ_i,η_i) 即为方程(13.2.13)的解. 显然

$$E_i=-\frac{\eta_i^2\hbar^2}{2ma^2}\tag{13.2.16}$$



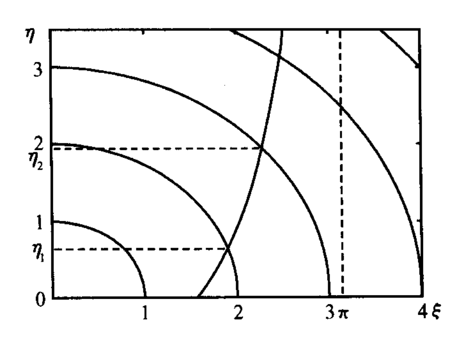


图 13.2.1　一维有限深势阱中的微观粒子能谱的确定

由图 13.2.1 可看出：圆半径较小时，即 $U_0a^2<\pi^2\hbar^2/(8m)$，圆与 $\eta=\xi\tan\xi$ 只有一个交点，也就是说，势阱中只存在一个束缚态，而且这个束缚态一定存在；当

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}<U_0a^2<4\,\frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \tag{13.2.17}$$

时，圆与 $\eta=\xi\tan\xi$ 和 $\eta=-\xi\cot\xi$ 各有一个交点，故势阱中存在两个束缚态；当

$$4\,\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}<U_0a^2<9\,\frac{\pi^2\hbar^2}{8m} \tag{13.2.18}$$

时，圆与 $\eta=\xi\tan\xi$ 有两个交点，与 $\eta=-\xi\cot\xi$ 有一个交点，故势阱中存在三个束缚态，等等，势阱越深能级越多. 当 $U_0\to\infty$时，$k\to\infty$，有无限多个交点：$\eta_i=n\pi/2(n=1,2,\cdots)$. 能级为

$$E_i=-\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \tag{13.2.19}$$

例 13.2.2　隧道效应：在 $x=-\infty$方向入射的粒子受势垒的散射.

解：　设一维势函数为

$$U(x)=\begin{cases}U_0>0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0,x>a\end{cases} \tag{13.2.20}$$

在经典力学中(由 1.2 节讨论)，若粒子的能量 $E>U_0$，则粒子可越过势垒，完全透射，仅仅是粒子速度变慢而已；如果粒子的能量 $E<U_0$，那么粒子不可能越过势垒，被完全反射. 但量子力学的结论有很大的不同，无论 $E>U_0$ 还是 $E<U_0$，透射波和反射波都存在. 定态 Schrödinger 方程为

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+U_0\psi=E\psi, \quad 0<x<a\\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=E\psi, \qquad\qquad x<0,x>a\end{aligned} \tag{13.2.21a}$$

在各个区域的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\exp(\mathrm{i}k_1x)+A'\exp(-\mathrm{i}k_1x), & x<0\\ B\exp(\mathrm{i}k_2x)+B'\exp(-\mathrm{i}k_2x), & 0<x<a\\ C\exp(\mathrm{i}k_1x), & x>a\end{cases} \quad (13.2.21\mathrm{b})$$

上式假定粒子在 $x=-\infty$ 方向入射，在 $x\to\infty$ 方向只存在透射波. 式中

$$k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}};\quad k_2=\sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}} \quad (13.2.22)$$

式(13.2.21b)中的诸系数由 $x=0$ 和 $x=a$ 处的边界条件决定：根据物理要求波函数连续；根据数学要求波函数的一阶导数应该连续，于是可以得到

$$C=\frac{4k_1k_2\exp(-\mathrm{i}k_1a)}{(k_1+k_2)^2\exp(-\mathrm{i}k_2a)-(k_1-k_2)^2\exp(\mathrm{i}k_2a)}A \quad (13.2.23\mathrm{a})$$

$$A'=\frac{2\mathrm{i}(k_1^2-k_2^2)\sin k_2a}{(k_1-k_2)^2\exp(\mathrm{i}k_2a)-(k_1+k_2)^2\exp(-\mathrm{i}k_2a)}A \quad (13.2.23\mathrm{b})$$

利用式(13.1.16)，相应于入射波、透射波和反射波

$$\psi_{in}(x)=A\exp(\mathrm{i}k_1x),\quad \psi_t(x)=C\exp(\mathrm{i}k_1x),\quad \psi_r(x)=A'\exp(-\mathrm{i}k_1x)$$

概率流密度分别为

$$J_{in}=\frac{\hbar k_1}{2m}|A|^2;\quad J_t=\frac{\hbar k_1}{2m}|C|^2;\quad J_r=-\frac{\hbar k_1}{2m}|A'|^2 \quad (13.2.24)$$

于是定义透射系数和反射系数分别为

$$D\equiv\left|\frac{J_t}{J_{in}}\right|=\frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a+4k_1^2k_2^2} \quad (13.2.25)$$

$$R\equiv\left|\frac{J_r}{J_{in}}\right|=\frac{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2k_2a+4k_1^2k_2^2} \quad (13.2.26)$$

上两式表明：即使 $E>U_0$，也存在反射，而不是像经典粒子那样完全穿过势垒. 显然 $D+R=1$.

如果 $E<U_0$，令

$$k_2=\mathrm{i}\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}\equiv\mathrm{i}\kappa_2 \quad (13.2.27)$$

于是(13.2.25)和(13.2.26)变成

$$D=\frac{4k_1^2\kappa_2^2}{(k_1^2+\kappa_2^2)^2\sinh^2\kappa_2a+4k_1^2\kappa_2^2} \quad (13.2.28)$$

$$R=\frac{(k_1^2+\kappa_2^2)^2\sinh^2\kappa_2a}{(k_1^2+\kappa_2^2)^2\sinh^2\kappa_2a+4k_1^2\kappa_2^2} \quad (13.2.29)$$

一般 $\kappa_2\gg1$，$\sinh^2\kappa_2a\approx\exp(2\kappa_2a)/4$，于是

$$D\sim\exp(2\kappa_2a)=\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}a\right] \quad (13.2.30\mathrm{a})$$

所以透射系数不为零，即粒子能够穿透比它的动能大的势垒，这一现象称为**隧道效**

应. 可以证明，当 U_0 在区间$[0,a]$不是常数，而是 x 的函数时，透射系数的表达式为上式的推广

$$D \sim \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^a \sqrt{2m[U_0(x)-E]}\mathrm{d}x\right] \tag{13.2.30b}$$

如果粒子受势阱而不是势垒的散射，即

$$U(x) = \begin{cases} -U_0, & 0 \leqslant x \leqslant a \\ 0, & x < 0, x > a \end{cases} \tag{13.2.31}$$

那么只要把 U_0 改成 $-U_0$，透射系数和反射系数仍然为方程(13.2.25)和(13.2.26). 注意：此时具有不为零的反射系数是经典力学完全无法解释的. 如果满足条件

$$k_2 a = n\pi \quad (n = 1, 2, \cdots) \tag{13.2.32}$$

那么 $D=1$ 和 $R=0$，粒子完全透射，称为**共振透射**. 这时

$$\sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{a} \tag{13.2.33}$$

即如果粒子具有能量

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2} - U_0 \tag{13.2.34}$$

则发生共振透射. 共振透射的物理图象为：粒子的 de Broglie 波长 λ 刚好满足方程(13.2.32)，或者 $2a=n\lambda$，粒子进入势阱后，经过各次反射而透射出去的波相位相同而形成相干叠加，使透射波大大增强，于是形成共振透射.

13.3　量子谐振子和谐振子的耦合

物理上，任何连续振动的体系都可看成是无限多个谐振子的集合. 因此谐振子的讨论在量子力学中非常重要.

一维谐振子：首先考虑简单的一维谐振子，Hamilton 函数为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{13.3.1}$$

定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \tag{13.3.2a}$$

引入无量纲常数

$$\xi \equiv \alpha x; \quad \alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{13.3.2b}$$

于是方程(13.3.2a)简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi=0 \tag{13.3.3a}$$

其中 $\lambda=2E/\hbar\omega$. $\xi\to\pm\infty$是上式的奇点，渐近形式为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}-\xi^2\psi=0,\quad \xi\to\pm\infty \tag{13.3.3b}$$

具有近似解 $\psi\sim\exp(\pm\xi/2)$，$\xi\to\pm\infty$处收敛的解为 $\psi\sim\exp(-\xi/2)$，故令方程(13.3.3a)的一般解为

$$\psi=\exp(-\xi/2)H(\xi) \tag{13.3.4}$$

代入方程(13.3.3a)得到

$$\frac{\mathrm{d}^2 H}{\mathrm{d}\xi^2}-2\xi\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\xi}+(\lambda-1)H=0 \tag{13.3.5}$$

上式称为 **Hermite 方程**. 一般情况下，Hermite 方程的解在 $\xi\to\pm\infty$的渐近表达式为 $H(\xi)\sim\exp(\xi^2)\to\infty$，故 $\psi\to\infty$发散. 但当 λ 满足一定条件时，上式存在多项式形式的解，那么 $\psi\to 0(\xi\to\pm\infty)$. 存在多项式解的条件为

$$\lambda=2n+1\quad(n=0,1,2,\cdots) \tag{13.3.6a}$$

即能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{13.3.6b}$$

此时，方程(13.3.5)的解 $H_n(\xi)$称为 **Hermite 多项式**

$$H_n(\xi)=(-1)^n\exp(\xi^2)\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\exp(-\xi^2) \tag{13.3.7}$$

因此一维谐振子的能级差为 $E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$，这正是 Planck 在解释黑体辐射时引入的假设. 另外，一维谐振子的最低能量为

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{13.3.8}$$

称为**零点能**，这是经典谐振子所没有的. 一维谐振子的波函数为

$$\psi_n(x)=N_n\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)H_n(\alpha x) \tag{13.3.9}$$

N_n 是归一化常数

$$N_n=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \tag{13.3.10}$$

最低几个谐振子波函数的形式为

$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right) \tag{13.3.11a}$$

$$\psi_1(x)=\frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right) \tag{13.3.11b}$$

$$\psi_2(x) = \frac{\sqrt{\alpha/2}}{\pi^{1/4}}(2\alpha^2x^2-1)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right) \tag{13.3.11c}$$

$$\psi_3(x) = \frac{\sqrt{3\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x\left(\frac{2}{3}\alpha^2x^2-1\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right) \tag{13.3.11d}$$

图 13.3.1 画出了量子谐振子的波函数和相应的能级，图中虚线为势函数.

量子谐振子与经典谐振子有较大的区别，特别是当量子谐振子处于基态时，性质与经典谐振子完全不同. ①基态能量：经典谐振子的最小能量为零，而 $E_0=\hbar\omega/2\neq 0$，这是微观粒子的波动性引起的；②基态概率分布：

$$|\psi_0(x)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\exp(-\alpha^2x^2) \tag{13.3.12}$$

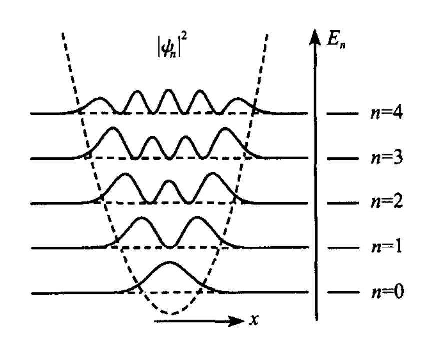


图 13.3.1　量子谐振子的波函数和能级

粒子在 $x=0$ 处出现的概率最大. 而对经典谐振子，当 $x=0$ 时，势能为零，动能极大，相应地粒子通过 $x=0$ 点的速度也极大，粒子在 $x=0$ 处逗留的时间最短，出现的概率最小，经典情况与量子情况正好相反；③基态粒子的运动范围：处于基态的谐振子具有能量 $E_0=\hbar\omega/2$，如果按经典谐振子，当粒子动能为零时，粒子运动到最远处，即

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2x_{\max}^2 \tag{13.3.13}$$

故经典谐振子最大的运动距离为 $x_{\max}=\sqrt{\hbar/(m\omega)}\equiv 1/\alpha$，而量子谐振子完全可以在 $x>x_{\max}$ 区域运动.

2 个耦合谐振子：考虑两个相同谐振子的耦合运动，Hamilton 函数为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2+x_2^2)+\frac{1}{2}k(x_1-x_2)^2 \tag{13.3.14}$$

最后一项表示两个谐振子的耦合. 因 $(x_1-x_2)^2=x_1^2-2x_1x_2+x_2^2$，平方项可合并，但存在交叉项. 作简正坐标变换

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2);\quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2) \tag{13.3.15}$$

方程(13.3.14)变成

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2\xi^2+\frac{1}{2}(m\omega^2+2k)\eta^2 \tag{13.3.16}$$

因此通过简正坐标变换，两个相互耦合的谐振子变成两个独立的谐振子. 定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)\psi(\xi,\eta)+\frac{1}{2}m\omega^2\xi^2\psi(\xi,\eta)$$
$$+\frac{1}{2}(m\omega^2+2k)\eta^2\psi(\xi,\eta)=E\psi(\xi,\eta) \tag{13.3.17}$$

令分离变量解 $\psi(\xi,\eta)=\psi_1(\xi)\psi_2(\eta)$代入上式得到

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi_1(\xi)+\frac{1}{2}m\omega^2\xi^2\psi_1(\xi)&=E_1\psi_1(\xi)\\-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2}\psi_2(\eta)+\frac{1}{2}(m\omega^2+2k)\eta^2\psi_2(\eta)&=E_2\psi_2(\eta)\end{aligned} \tag{13.3.18}$$

其中 $E=E_1+E_2$. 因此在简正坐标中波函数为

$$\psi_{n,l}(\xi,\eta)=N_nN_l\exp\left[-\frac{1}{2}(\alpha_1^2\xi^2+\alpha_2^2\eta^2)\right]H_n(\alpha_1\xi)H_l(\alpha_2\eta) \tag{13.3.19}$$

注意:上式中的 ξ 不是方程(13.3.7)的 ξ. 相应的能级为

$$E_{nl}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 \quad (n,l=0,1,2,\cdots) \tag{13.3.20a}$$

其中

$$\omega_1=\omega,\quad \omega_2=\omega\sqrt{1+\frac{2k}{m\omega^2}},\quad \alpha_\sigma\equiv\sqrt{\frac{m\omega_\sigma}{\hbar}} \quad (\sigma=1,2) \tag{13.3.20a}$$

N 个耦合谐振子:由 5.4 节的讨论,系统的 Hamilton 函数为

$$\hat{H}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{\partial^2}{\partial u_i^2}+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3N}a_{ij}u_iu_j \tag{13.3.21}$$

其中 $u_i(i=1,2,\cdots,N)$为谐振子的位移. 显然由于交叉项(即耦合项)的存在,求解 Schrödinger 方程

$$\left(-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{\partial^2}{\partial u_i^2}+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}a_{ij}u_iu_j\right)\psi=E\psi \tag{13.3.22}$$

是十分困难的. 由 5.4 节,我们总能找到适当的坐标变换

$$u_i=\frac{1}{\sqrt{m_i}}\sum_{k=1}^{N}A_{ik}q_k \tag{13.3.23}$$

使方程(13.2.22)在简正坐标中化成正则形式

$$\sum_{k=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial q_k^2}+\frac{1}{2}\omega_k^2q_k^2\right)\psi=E\psi \tag{13.3.24}$$

这样 N 个耦合的谐振子在简正坐标中化成了 N 个独立的谐振子,能量为

$$E=\sum_{k=1}^{N}\left(n_k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_k \tag{13.3.25}$$

13.4 有心力场中粒子的运动和氢原子的量子描述

由第 1 章的讨论,在经典力学中,有心力场中运动的粒子轨道在一个垂直于角

动量的平面内. 粒子的 Hamilton 函数为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m_e}+U(r)=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2+U(r) \tag{13.4.1}$$

式中 m_e 为粒子的质量. 定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi+U(r)\psi=E\psi \tag{13.4.2}$$

在球坐标下，即为

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi+U(r)\psi=E\psi \tag{13.4.3}$$

令上式的分离变量解为

$$\psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)Y(\vartheta,\varphi)=R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) \tag{13.4.4}$$

代入方程(13.4.3)得到

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left\{\frac{2m_e}{\hbar^2}[E-U(r)]-\frac{\lambda}{r^2}\right\}R=0 \tag{13.4.5}$$

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{d\Theta}{d\vartheta}\right)+\left(\lambda-\frac{\nu}{\sin^2\vartheta}\right)\Theta=0 \tag{13.4.6}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}+\nu\Phi=0 \tag{13.4.7}$$

由波函数的单值性，方位角方向波函数的周期性边界条件为

$$\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi) \tag{13.4.8}$$

于是要求 $\nu=m^2$，故方程(13.4.7)的解为

$$\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(\mathrm{i}m\varphi)\quad(m=0,\pm1,\pm2,\cdots) \tag{13.4.9}$$

上式中因子 $1/\sqrt{2\pi}$ 源于归一化. 令 $x=\cos\vartheta(-1\leqslant x\leqslant1)$，方程(13.4.6)变成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}x}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta=0 \tag{13.4.10}$$

称为**连带 Legendre 方程**，在 $x=\pm1$ 有两个正则奇点. 在正则奇点存在有限解的条件为

$$\lambda=l(l+1)\quad(l=0,1,2,\cdots) \tag{13.4.11}$$

相应的解为连带 Legendre 函数

$$\Theta(\vartheta)=P_l^{|m|}(\cos\vartheta) \tag{13.4.12}$$

连带 Legendre 函数的微分形式

$$P_l^{|m|}(x)=(1-x^2)^{|m|/2}\frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}x^{|m|}}P_l(x) \tag{13.4.13a}$$

而 $P_l(x)$ 为 l 阶 Legendre 多项式，前 5 个 Legendre 多项式为

$$P_0(x)=1;\quad P_1(x)=x;\quad P_2(x)=\frac{1}{2}(3x^2-1)$$
$$P_3(x)=\frac{1}{4}(5x^3-3x);\quad P_4(x)=\frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3) \tag{13.4.13b}$$

Legendre 多项式最高幂次为 l,故要求 $|m|\leqslant l$,即对给定的 l,m 只能有 $(2l+1)$ 个可能的取值:$m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$.

综上所述,Schrödinger 方程的角度部分的解为

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi)=N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\exp(im\varphi) \tag{13.4.14a}$$

其中归一化系数为

$$N_{lm}=\sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}} \tag{13.4.14b}$$

$Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ 称为**球谐函数**. 常用的 4 个低阶球谐函数为

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}};\quad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\vartheta \tag{13.4.15a}$$

$$Y_{11}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\exp(\mathrm{i}\varphi);\quad Y_{1-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\vartheta\exp(-\mathrm{i}\varphi) \tag{13.4.15b}$$

一般称 $l=0$ 的量子态为 s 态,$l=1$ 的态为 p 态,$l=2$ 的态为 d 态,等等. 显然在 s 态,m 只能取零,即 $m=0$;在 p 态,m 可取 3 个值,即 $m=0,\pm1$;在 d 态,m 可取 5 个值,即 $m=0,\pm1,\pm2$.

再看径向部分 $R(r)$ 满足的方程(13.4.5). 因为涉及到势函数的具体形式,我们考虑氢原子中核外电子的运动. 由于质子的质量远大于电子的质量,故可认为质子位于原点不动,核外电子在库仑吸引力作用下运动. 当然,如果要考虑核的运动,则质子和电子构成两体运动问题,可分解成质心的平动以及电子与质子的相对运动. 我们关心的是相对运动,假定质子位于原点不动,电子的 Hamilton 函数为

$$H=\frac{p^2}{2m_e}+U(r)=\frac{p^2}{2m_e}-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{13.4.16}$$

其中 Z 是为了使得到的公式对类氢原子也适用,对氢原子,$Z=1$. 引入无量纲量

$$\rho=\frac{Zr}{a_0},\quad a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}=0.529\times10^{-10}\mathrm{m} \tag{13.4.17}$$

$$\varepsilon=\frac{E}{2E_0Z^2},\quad E_0=\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}=13.625\mathrm{eV} \tag{13.4.18}$$

其中 a_0 称为**第一 Bohr 半径**,E_0 为氢原子电离势. 于是方程(13.4.5)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[2\varepsilon+\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi=0 \tag{13.4.19}$$

其中函数变换为 $\chi(\rho)=rR(r)$. 当 $\rho\to\infty$ 时,上式的渐近形式为

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+2\varepsilon\chi=0 \tag{13.4.20}$$

如果 $\varepsilon>0$，χ 的解为

$$\chi=C_1\sin(\sqrt{2\varepsilon}\rho)+C_2\cos(\sqrt{2\varepsilon}\rho) \tag{13.4.21}$$

(13.4.21)式对 ε 没有任何限制，而波函数可扩展到无限远处，故不是原子核束缚核外电子的状态；如果 $\varepsilon<0$，χ 的解为

$$\chi=C\exp(-\sqrt{2|\varepsilon|}\rho)+D\exp(\sqrt{2|\varepsilon|}\rho) \tag{13.4.22}$$

(13.4.22)式第二项发散，故取 $D=0$，第一项指数衰减，代表束缚态. 因此束缚态时，氢原子的能量小于零. 当 $\rho\to 0$ 时，方程(13.4.19)的渐近形式为

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}\chi=0 \tag{13.4.23}$$

上式为 Euler 方程，存在幂次形式的解

$$\chi_1=\rho^{-l},\quad \chi_2=\rho^{l+1} \tag{13.4.24}$$

χ_1 在原点发散，故舍去. 考虑到 $\rho\to 0$ 和 $\rho\to\infty$ 解的特征，因此令

$$\chi=\rho^{l+1}\exp(-\beta\rho)u(\rho) \tag{13.4.25}$$

其中 $\beta=\sqrt{-2\varepsilon}$. 方程(13.4.19)简化成

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+[2(l+1)-\xi]\frac{du}{d\xi}+\alpha u=0 \tag{13.4.26}$$

其中 $\xi=2\beta\rho$ 和 $\alpha=1/\beta-(l+1)$. 显然 $\xi\to+\infty$ 是方程的正则奇点，上式在 $\xi\to+\infty$ 存在有限解的条件为

$$\alpha=n_r\quad (n_r=0,1,2,\cdots) \tag{13.4.27a}$$

即

$$\frac{1}{\beta}=n_r+(l+1)\equiv n\quad (n=1,2,\cdots) \tag{13.4.27b}$$

因此，氢原子的能量为

$$E_n\equiv E=-\frac{m_e Z^2 e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \tag{13.4.28}$$

由式(13.4.27)可见：给定 n，l 的取值为 $l=0,1,2,\cdots,(n-1)$.

因此，氢原子的本征函数为

$$\psi(r,\vartheta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{13.4.29}$$

其中径向波函数为

$$R_{nl}(r)=\sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right)\left(\frac{2Z}{na_0}r\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Z}{na_0}r\right)$$

其中 L_{n+l}^{2l+1} 为连带 Laguerre 多项式

$$L_{n+l}^{2l+1}(x)=\sum_{k=0}^{n-l-1}(-1)^{k+1}\frac{[(n+l)!]^2x^k}{(n-l-1-k)!(2l+1+k)!k!}$$

$R_{nl}(r)$的前 3 个表达式为

$$R_{10}(r)=2\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}\exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) \tag{13.4.30a}$$

$$R_{20}(r)=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}\left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right)\exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \tag{13.4.30b}$$

$$R_{21}(r)=\frac{1}{2\sqrt{6}}\sqrt{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}\frac{Zr}{a_0}\exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right) \tag{13.4.30c}$$

相应的能量本征值由式(13.4.28)决定.

氢原子的磁矩:量子数 n、l 和 m 分别称为**主量子数**、**角动量量子数**和**磁量子数**(角动量量子数的意义将在第 14 章讨论).为什么称 m 为磁量子数呢?氢原子核外电子的运动产生的电流密度矢量显然为

$$j=\frac{\mathrm{i}e\hbar}{2m_\mathrm{e}}(\psi_{nlm}^*\nabla\psi_{nlm}-\psi_{nlm}\nabla\psi_{nlm}^*) \tag{13.4.31}$$

球坐标中梯度算子为

$$\nabla=\frac{\partial}{\partial r}\boldsymbol{e}_r+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\boldsymbol{e}_\vartheta+\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{13.4.32}$$

由于 $R_{nl}(r)$及 $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$中关于 r 和 ϑ 部分的函数均为实函数,因此

$$j_r=j_\vartheta=0 \tag{13.4.33a}$$

而

$$\begin{aligned}j_\varphi&=\frac{\mathrm{i}e\hbar}{2m_\mathrm{e}}\frac{1}{r\sin\vartheta}\left(\psi_{nlm}^*\frac{\partial\psi_{nlm}}{\partial\varphi}-\psi_{nlm}\frac{\partial\psi_{nlm}^*}{\partial\varphi}\right)\\&=-\frac{em\hbar}{m_\mathrm{e}}\frac{1}{r\sin\vartheta}|\psi_{nlm}|^2\end{aligned} \tag{13.4.33b}$$

取 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 为垂直于电流方向,距原点为 r 的面积元(如图 13.4.1),则通过 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 圆面的电流为 $\mathrm{d}I=j_\varphi\mathrm{d}S$,相应的总磁矩为

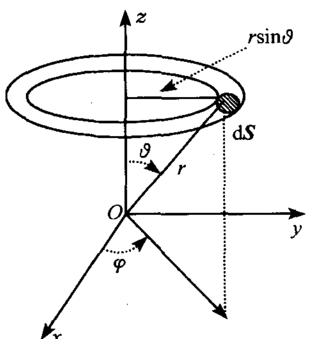


图 13.4.1 氢原子的磁矩

$$\begin{aligned}\mu_z&=\int\pi r^2j_\varphi\sin^2\vartheta\mathrm{d}S=-\frac{em\hbar}{2m_\mathrm{e}}\int2\pi r\sin\vartheta|\psi_{nlm}|^2\mathrm{d}S\\&=-\frac{em\hbar}{2m_\mathrm{e}}\int|\psi_{nlm}|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=-m\mu_\mathrm{B}\end{aligned} \tag{13.4.34}$$

其中 $\mu_\mathrm{B}=e\hbar/(2m_\mathrm{e})$称为 **Bohr 磁子**.从式(13.4.34)可见:氢原子的磁矩是量子化的,与量子数 m 有关,故 m 称为**磁量子数**.

氢原子量子态的简并:注意到氢原子的能量本征值仅与主量子数有关,给定主量子数 n 后,由式

(13.4.27b)，角动量量子数最大为$(n-1)$，故 l 取值可以为

$$l = 0,1,2,\cdots,(n-1) \tag{13.4.35}$$

有 n 种选择；而磁量子数可以为

$$m = 0,\pm 1,\pm 2,\cdots,\pm l \tag{13.4.36}$$

有$(2l+1)$种选择. 故共有

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \tag{13.4.37}$$

个不同的本征函数（因为本征函数与主量子数、角动量量子数和磁量子数都有关）具有同一个能量本征值. 这种情况称为**简并**. 同一个能量本征值对应于 f 个不同的本征函数，称为 f 度简并. 显然氢原子的简并度为 n^2. 简并的概念在量子力学里非常重要，以后我们还要讨论.

与经典力学比较：①核外电子的经典轨道在垂直于轨道角动量的平面，而在量子描述中，核外电子在空间任意一点出现都有一定的概率；②经典的电子做加速运动，要辐射电磁波，因而是不稳定的（见习题 10.8），而在量子描述中，电子处于一定的稳定态，可以稳定存在；③经典的电子辐射连续波，而在量子描述中，电子能量是量子化的，电子从一个能级跃迁到另一个能级，从而发出线状光谱；④经典电子的角动量守恒，而在量子描述中，电子的角动量也守恒，并且 z 方向的投影（见第 14 章讨论）也守恒，但它们是量子化的.

习　题　13

13.1　在宏观世界里，量子现象往往可以忽略，对下列三种情况，在数值上加以证明：(1) 长 $l=1\text{m}$，质量 $m=1\text{kg}$ 单摆的零点振动的振幅；(2) 质量为 $m=5\text{g}$，以速度 10cm/s 向一刚性障碍物（高 5cm，宽 1cm）运动的子弹的透射率；(3) 质量 $m=0.1\text{kg}$，以速度 0.5m/s 运动的钢球被 $1\text{m}\times1.5\text{m}$ 的窗口所衍射.（提示：(2) $U_0=mgh$，能量为动能；(3) 衍射角 $\vartheta\approx\lambda/D$，$\lambda$ 为 de Broglie 波长，D 为窗口的高度或宽度）

答案：(1) $A\sim10^{-17}\text{m}$；　(2) $T\sim1/\text{e}^{30}$；　(3) 衍射角大约 $\vartheta\sim10^{-32}\text{rad}$.

13.2　一维运动的粒子处于量子态

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax\exp(-\lambda x), & x \geqslant 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

其中 $\lambda>0$. 求：(1) 归一化系数 A；(2) 粒子坐标的概率分布；(3) 粒子坐标和粒子坐标平方的平均值；(4) 粒子的动量分布；(5) 粒子动量和粒子动量平方的平均值；(6) 验证不确定关系（见下章讨论）.

答案：(1) $A=2\lambda^{3/2}$；　(2)（略）；　(3) $\overline{x}=3/2\lambda$，　$\overline{x^2}=3/\lambda^2$；

(4) $|c(p)|^2=\frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi(\lambda^2\hbar^2+p^2)^2}$； (5) $\overline{p}=0$，$\overline{p^2}=\lambda^2\hbar^2$；

(6) $(\Delta x)^2(\Delta p)^2=(\overline{x^2}-\overline{x}^2)(\overline{p^2}-\overline{p}^2)=3\hbar^2/4>\hbar^2/4$.

13.3 设 $t=0$ 时，粒子处于量子态

$$\psi(x)=A\left[\sin^2(kx)+\frac{1}{2}\cos(kx)\right]$$

求此时粒子的平均动量和平均动能.（提示：利用三角函数展开成多个平面波，A 由动量归一化条件决定）

答案：$\overline{p}=0$； $\overline{T}=\frac{\overline{p^2}}{2m}=\frac{5k^2\hbar^2}{8m}$.

13.4 一个质量为 m 的粒子在一维无限深势阱（$0<x<a$）中运动，$t=0$ 时刻的初态为

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{8}{5a}}\left(1+\cos\frac{\pi x}{a}\right)\sin\frac{\pi x}{a}$$

(1) 在某一时刻 $t_0>0$ 的波函数是什么？(2) 体系在 $t=0$ 和 $t=t_0$ 时的平均能量是什么？(3) $t=t_0$ 时在势阱左半部（$0<x<a/2$）发现粒子的概率是多少？

答案：(2) $t=0$ 和 $t=t_0$ 平均能量相同

$$\langle E\rangle=\frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2};\quad (3)\ P_{x<a/2}=\frac{1}{2}+\frac{16}{15\pi}\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}.$$

13.5 自由转子的 Hamilton 函数为

$$H=\frac{J_z^2}{2I}$$

其中 I 为转动惯量，设转子在 xOy 平面内自由转动，转角为 φ. (1) 求能量本征值和相应的本征函数；(2) 在 $t=0$ 时刻，转子的波函数为 $\psi(\varphi)=A\sin^2\varphi$，求 $t>0$ 时刻的波函数.（提示：$\hat{J}_z^2=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$，利用周期性边界条件求解）

答案：(1) $E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2I}$ （$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$）， $\psi_n(\varphi)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\exp(in\varphi)$.

13.6 一个电子被禁闭在一维盒子中且处于基态，盒宽为 10^{-10}m，电子能量为 38eV，计算：(1) 第一激发态的能量；(2) 当电子处于基态时，盒壁所受的平均压力.（提示：$\langle F\rangle=-\frac{\mathrm{d}E_1}{\mathrm{d}a}$，其中 a 为盒宽）

答案：(1) $E_2=152$eV； $\langle F\rangle=7.6\times10^9$ eV/cm.

13.7 质量为 m 的粒子处于一维势 $U(x)=-U_0\delta(x)$ 中运动，求束缚能.（提示：对 Schrödinger 方程积分，求一阶导数的跃变）

答案：$E=-\frac{mU_0^2}{2\hbar^2}$.

13.8　在 $t=0$ 时，一维谐振子处于量子态

$$\psi(x,0)=A\exp\left(-\frac{a^2x^2}{2}\right)\left[\cos\beta H_0(ax)+\frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}H_2(ax)\right]$$

其中 A 和 β 为实常数，$a^2=\sqrt{mk}/\hbar$，H_0 和 H_2 为 Hermite 多项式. (1) 写出 $t>0$ 时的波函数；(2) 在该态中测量能量的可能值，它们的相对概率是多少？(3) 在 $t=0$时刻$\langle x\rangle$是多少？$\langle x\rangle$随时间变化如何？（提示：$\psi(x,t)$关于 x 是偶函数）

答案：(2) $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$，　$E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$，　相对概率$\frac{P_0}{P_2}=\frac{\cos^2\beta}{\sin^2\beta}$；(3) $\langle x\rangle=0$，不随时间变化.

13.9　一个电子被禁闭在 L^3 的立方体内. (1) 求能级分布和相应的波函数；(2) 给定能量 E，求能量小于 E 的量子态数(即态密度).

答案：(1) $E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$；(2) $N=\frac{4\pi}{3}\left(\frac{mL^2}{2\hbar^2\pi^2}E\right)^{3/2}$.

13.10　一个电子被禁闭在半径为 R 的球形盒子中. (1) 求基态能量；(2) 求电子处于基态时，电子对盒壁的平均压力. (提示：$\langle F\rangle=-\frac{\mathrm{d}E_1}{\mathrm{d}R}$)

答案：(1) $E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mR^2}$；(2) $\langle F\rangle=\frac{\hbar^2\pi^2}{mR^3}$.

13.11　氢原子处于基态，求 $\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}$和 $\Delta p_x=\sqrt{\langle p_x^2\rangle-\langle p_x\rangle^2}$. (提示：基态波函数 $\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$是球对称的：$\langle x\rangle=\langle p_x\rangle=0$. 利用

$$\langle x^2\rangle=\langle y^2\rangle=\langle z^2\rangle=\langle r^2\rangle/3,\quad \langle p_x^2\rangle=\langle p_y^2\rangle=\langle p_z^2\rangle=\langle p^2\rangle/3$$

$$\langle r^2\rangle=4\pi\int_0^\infty r^2(\psi_{100})^2\mathrm{d}r=\frac{\hbar^2}{\sqrt{3}a_0};\quad \langle p^2\rangle=\hbar^2\int_0^\infty|\nabla\psi_{100}|^2\mathrm{d}r=\frac{\hbar^2}{a_0^2})$$

答案：$\Delta x=a_0$，$\Delta p_x=\hbar/\sqrt{3}a_0$.

13.12　设粒子在半径为 a 的无限长圆管中运动，求粒子的能级. (提示：在柱坐标中，Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{L_z^2}{2m\rho^2}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi=E\psi$$

然后用分离变量法，径向部分满足 Bessel 方程)

答案：$E_n=\hbar^2(k^2+\lambda_n^2)/(2m)$，$k$ 是 z 方向的波数(连续谱)，λ_n 是 Bessel 函数的第 n 个根.

第 14 章　力学量、算符和量子态

上一章中，我们用算符来代替粒子的动量和 Hamilton 函数，得到了 Schrödinger 方程. 问题是：这种力学量用算符来表示的对应关系是否具有更深刻的物理内涵？是否任何力学量均可用算符来表示？除 Hamilton 算符外，其他算符是否也存在相应的本征方程和本征函数（定态 Schrödinger 方程即为 Hamilton 算符的本征方程）？如果存在，不同算符的本征函数之间的关系又如何？如果一切力学量均可用算符来表示，那么表示力学量的算符应满足什么条件？本章将回答这些问题.

14.1　力学量的平均值与算符运算

由方程(13.1.3)，与空间坐标有关的微观粒子的力学量 $f(\boldsymbol{r})$ 的统计平均值容易计算. 如果力学量不是坐标的函数，又如何计算统计平均值？以动量为例，已知波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$，如何求 $\bar{\boldsymbol{p}}$？$\psi(\boldsymbol{r})$ 可按动量为 $\boldsymbol{p}$ 的平面波展开

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int\varphi(\boldsymbol{p})\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{p} \tag{14.1.1}$$

其中

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int\psi(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.1.2}$$

显然 $|\varphi(\boldsymbol{p})|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$ 表示粒子动量在 $\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ 之间的概率，故在量子态 $\psi(\boldsymbol{r})$，粒子的统计平均值 $\bar{\boldsymbol{p}}$ 为

$$\langle\boldsymbol{p}\rangle = \int\varphi^*(\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}^3\boldsymbol{p} \tag{14.1.3}$$

上式假定波函数已归一化. 由方程(14.1.2)，上式化为

$$\langle\boldsymbol{p}\rangle = \int\psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\int\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\left\{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\boldsymbol{p}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\right\} \tag{14.1.4a}$$

利用关系

$$\begin{aligned}&\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\boldsymbol{p}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\\&=(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\\&=(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\end{aligned} \tag{14.1.4b}$$

式(14.1.4a)变成

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}(-\mathrm{i}\hbar\nabla) \int \psi(\boldsymbol{r}') \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$$= \int \psi^*(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \equiv \int \psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.1.5}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$ 就是式(13.1.8)中的动量算符. 当 n 是整数时,$p_i^n(i=x,y,z)$的统计平均值为

$$\langle p_i^n \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}) \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}\right)^n \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.1.6}$$

其中 $x_1=x, x_2=y, x_3=z$. 对于任何动量的解析函数 $f(\boldsymbol{p})$,总可以按 $\boldsymbol{p}$ 作展开,然后利用上式求平均,于是

$$\langle f(\boldsymbol{p}) \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}) f(\hat{\boldsymbol{p}}) \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.1.7}$$

例如,动能的平均为

$$\langle T \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.1.8}$$

角动量的平均为

$$\langle \boldsymbol{l} \rangle = \langle \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}) [\boldsymbol{r} \times (-\mathrm{i}\hbar\nabla)] \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.1.9}$$

可见在求平均值的意义下,力学量可以用算符来表示. 把式(14.1.7)推广到一般的算符:体系的任何一个力学量 A 在量子态 $\psi(\boldsymbol{r},t)$的平均值可以表示为

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t) \hat{A} \psi(\boldsymbol{r},t) \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \equiv (\psi, \hat{A}\psi) \tag{14.1.10}$$

为此,首先介绍算符运算的法则和若干性质.

1. 线性算符:对算符 $\hat{A}$ 作用的任意两个函数 ψ_1 和 ψ_2,以及任意两个复数 c_1 和 c_2,存在运算关系

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 \tag{14.1.11}$$

称 $\hat{A}$ 为**线性算符**. 由于叠加原理的要求,量子力学中描述可观察量的算符都是线性算符. 但注意:量子力学中的算符不都是线性算符,如取复共轭就不是线性算符;

2. 单位算符:算符 $\hat{I}$ 作用的任意一个函数 ψ,恒有

$$\hat{I}\psi = \psi \tag{14.1.12}$$

称 $\hat{I}$ 为**单位算符**;

3. 算符相等:算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 作用的任意一个函数 ψ,恒有

$$\hat{A}\psi = \hat{B}\psi \tag{14.1.13}$$

称 $\hat{A}$ 等于 $\hat{B}$,即两个算符相等;

4. 算符相加:算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 相加$(\hat{A}+\hat{B})$定义为:对算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 作用的任意一

个函数 ψ,关系成立

$$(\hat{A}+\hat{B})\psi=\hat{A}\psi+\hat{B}\psi \tag{14.1.14}$$

例如 Hamilton 算符为动能算符与势能算符之和. 显然算符相加满足交换律和结合律,即

$$\hat{A}+\hat{B}=\hat{B}+\hat{A},\quad \hat{A}+(\hat{B}+\hat{C})=(\hat{A}+\hat{B})+\hat{C} \tag{14.1.15}$$

5. 算符相乘:算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 相乘($\hat{A}\hat{B}$)定义为:对算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 作用的任意一个函数 ψ,关系成立

$$(\hat{A}\hat{B})\psi=\hat{A}(\hat{B}\psi) \tag{14.1.16}$$

即先用 $\hat{B}$ 对 ψ 运算得到($\hat{B}\psi$),再用 $\hat{A}$ 对($\hat{B}\psi$)运算. 一般来说,算符相乘不满足交换律:$\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$. 定义算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易子

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \tag{14.1.17}$$

如果$[\hat{A},\hat{B}]=0$,称**算符** $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ **对易**.

例 14.1.1 以位置算符 $\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r}$、动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 和角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 为例说明算符相乘的意义.

解: 取 $\hat{A}=x,\hat{B}=\hat{p}_x$,显然

$$x\hat{p}_x\psi=-\mathrm{i}\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x};\quad \hat{p}_x x\psi=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)=-\mathrm{i}\hbar x\frac{\partial\psi}{\partial x}-\mathrm{i}\hbar\psi$$

故$(x\hat{p}_x-\hat{p}_x x)\psi=\mathrm{i}\hbar\psi$,由 ψ 的任意性有

$$x\hat{p}_x-\hat{p}_x x=\mathrm{i}\hbar \tag{14.1.18}$$

同理有

$$y\hat{p}_y-\hat{p}_y y=\mathrm{i}\hbar;\quad z\hat{p}_z-\hat{p}_z z=\mathrm{i}\hbar \tag{14.1.19}$$

写成统一的形式

$$[x_\alpha,\hat{p}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}\quad(\alpha,\beta=1,2,3) \tag{14.1.20}$$

角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 涉及到经典粒子轨道运动的描述方法,即位置矢量和动量,故称为**轨道角动量算符**,它具有对易关系

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_z;\quad [\hat{L}_y,\hat{L}_z]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_x;\quad [\hat{L}_z,\hat{L}_x]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_y \tag{14.1.21}$$

可以写成形式

$$\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}} \tag{14.1.22}$$

上式是从轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 推导出来的. 但可以利用上式直接定义角动量算符:如果一个力学量的算符 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 满足对易关系式(14.1.22),就称**这个力学量为角动量**. 角动量这一概念的推广在讨论微观粒子的自旋角动量时非常重要.

定义角动量平方算符

$$\hat{L}^2\equiv\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2 \tag{14.1.23}$$

显然有

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}_y^2,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z^2,\hat{L}_x]$$
$$=\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{L}_x]+[\hat{L}_y,\hat{L}_x]\hat{L}_y+\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{L}_x]+[\hat{L}_z,\hat{L}_x]\hat{L}_z$$
$$=-\mathrm{i}\hbar(\hat{L}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{L}_y)+\mathrm{i}\hbar(\hat{L}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{L}_z)=0 \tag{14.1.24}$$

注意上式证明只用到对易式(14.1.22),而没有用到角动量算符的具体形式. 对 y 和 z 方向可得到同样的结果. 故存在关系

$$[\hat{L}^2,\hat{L}_\alpha]=0 \quad (\alpha=x,y,z) \tag{14.1.25}$$

因此角动量的每个分量不对易,但每个分量与角动量平方算符对易!

6. 逆算符:算符 $\hat{A}$ 作用的任意一个函数 ψ:$\hat{A}\psi=\varphi$. 如果能从该式中唯一解出 ψ,则定义算符 $\hat{A}$ 的**逆算符** $\hat{A}^{-1}$ 为 $\hat{A}^{-1}\varphi=\psi$. 如算符 $\hat{A}$ 的逆算符 $\hat{A}^{-1}$ 存在,那么 $\hat{A}^{-1}\hat{A}=\hat{A}\hat{A}^{-1}=\hat{I}$;

7. 算符的函数:设函数 $f(x)$ 的各阶导数存在且 Taylor 展开为

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n \tag{14.1.26}$$

则定义算符 $\hat{A}$ 的函数 $f(\hat{A})$ 如下

$$f(\hat{A})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n \tag{14.1.27}$$

例如 $f(x)=\exp(ax)$

$$f\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \tag{14.1.28}$$

不难看出

$$\exp\left(a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)F(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^nF(x)}{\mathrm{d}x^n}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{F^{(n)}(x)}{n!}a^n=F(x+a)$$

故上式左边的算符称为**平移算符**.

14.2 Hilbert 空间上的 Hermite 算符和本征值问题

本节介绍特殊性质的算符,即 Hilbert 空间上的 Hermite 算符概念. 根据泛函分析理论,完备的内积空间称为 **Hilbert 空间**. 所谓内积空间是指定义在数域 F 上的矢量空间 L,对它的每一对矢量 ψ 和 φ 可以定义内积 (ψ,φ) 满足下述公理:

(1) 正定性:$(\psi,\psi)\geqslant 0$ 当且仅当 $\psi=0$ 时等号成立;

(2) 共轭对称性:$(\psi,\varphi)=(\varphi,\psi)^*$;

(3) 线性:$(a\psi+b\varphi,\phi)=a^*(\psi,\phi)+b^*(\varphi,\phi)$.

内积的引进使我们可以定义矢量之间的"角度",从而可讨论矢量的正交性. 所

谓“完备”则指 L 中的每一 Cauchy 序列都收敛于 L 中的一个元素. 量子力学感兴趣的是由元素为有限空间 V 上的平方可积复值函数组成的函数空间,记为$L^2[V]$. 可以证明这个函数空间是一个完备的内积空间,因此是一个 Hilbert 空间. 函数空间 $L^2[V]$上 ψ 和 φ 的内积定义为

$$(\psi,\varphi) = \int_V \psi^*(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.2.1}$$

由上式定义的内积显然满足公理(1)、(2)和(3),因此 $L^2[V]$是一个内积空间.

Hilbert 空间中的线性算符 $\hat{A}$ 的**共轭算符** $\hat{A}^\dagger$ 定义为

$$(\hat{A}\psi,\varphi) = (\psi,\hat{A}^\dagger\varphi) \tag{14.2.2}$$

其中 ψ 和 φ 为 Hilbert 空间中任一对矢量. 对 $L^2[V]$,上式可写成

$$\int_V (\hat{A}\psi)^* \varphi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_V \psi^* \hat{A}^+ \varphi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.2.3}$$

如果 $\hat{A}^\dagger=\hat{A}$ 则称 $\hat{A}$ 为 **Hermite 算符**,显然有关系式

$$\int_V (\hat{A}\psi)^* \varphi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_V \psi^* \hat{A}\varphi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.2.4}$$

或者

$$(\hat{A}\psi,\varphi) = (\psi,\hat{A}\varphi) \tag{14.2.5}$$

Hermite 算符 $\hat{A}$ 的本征值问题就是求下列方程的非零解

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi \tag{14.2.6}$$

上式称为**本征方程**. $\psi=0$ 总是一个解,这个解称为**平庸解**,而我们感兴趣的是非平庸解. 并不是对一切 λ,非平庸解总存在. λ 只能取某些特定的值 λ_n(n 可能为几个量子数的集合),上式才有相应的非零解 ψ_n,λ_n 称为算符 $\hat{A}$ 的**本征值**. 与 λ_n 相对应的非零解 ψ_n 称为本征值 λ_n 相对应的**本征函数**. 如果给定一个 λ_n,只有一个 ψ_n 与之对应,则称 λ_n 是**非简并的**;反之,如果给定一个 λ_n 有 l 个线性独立的解 ψ_n^i($i=1,2,\cdots,l$)同时满足方程(14.2.6),则称 λ_n 是 l 度简并的. λ_n 的全体$\{\lambda_n\}$称为**本征谱**. 如果 λ_n 是可数的,称$\{\lambda_n\}$为**分立谱**,否则称为**连续谱**.

下面简单介绍 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的基本性质.

(1) Hermite 算符 $\hat{A}$ 平均值是实数:

$$\langle A\rangle = \int_V \psi^* \hat{A}\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_V (\hat{A}\psi)^* \psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \left[\int_V \psi^* \hat{A}\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right]^* = \langle A\rangle^*$$

(2) 对 Hilbert 空间中任一矢量 ψ,平均值均为实数的算符一定是 Hermite 算符:因为$\langle A\rangle=\langle A\rangle^*$,即

$$(\psi,\hat{A}\psi) = (\psi,\hat{A}\psi)^* = (\hat{A}\psi,\psi) \tag{14.2.7}$$

但根据 Hermite 算符的定义式(14.2.5)，必须证明$(\psi,\hat{A}\varphi)=(\hat{A}\psi,\varphi)$. 为此令 $\psi=\psi_1+\psi_2$ 并且代入上式得到

$$\langle(\psi_1+\psi_2),\hat{A}(\psi_1+\psi_2)\rangle=\langle\hat{A}(\psi_1+\psi_2),(\psi_1+\psi_2)\rangle \tag{14.2.8}$$

展开后即为

$$\begin{aligned}&(\psi_1,\hat{A}\psi_1)+(\psi_2,\hat{A}\psi_2)+(\psi_1,\hat{A}\psi_2)+(\psi_2,\hat{A}\psi_1)\\&=(\hat{A}\psi_1,\psi_1)+(\hat{A}\psi_2,\psi_2)+(\hat{A}\psi_1,\psi_2)+(\hat{A}\psi_2,\psi_1)\end{aligned} \tag{14.2.9}$$

由式(14.2.7)得到

$$(\psi_1,\hat{A}\psi_2)+(\psi_2,\hat{A}\psi_1)=(\hat{A}\psi_1,\psi_2)+(\hat{A}\psi_2,\psi_1) \tag{14.2.10}$$

作变换，令 $\psi_1\to\psi_1 e^{ia}$；$\psi_2\to\psi_2 e^{ib}$，上式变成

$$e^{i(b-a)}[(\psi_1,\hat{A}\psi_2)-(\hat{A}\psi_1,\psi_2)]=e^{-i(b-a)}[(\hat{A}\psi_2,\psi_1)-(\psi_2,\hat{A}\psi_1)]$$

而 a 和 b 任意，上式恒成立条件为

$$(\psi_1,\hat{A}\psi_2)-(\hat{A}\psi_1,\psi_2)=0;\quad(\hat{A}\psi_2,\psi_1)-(\psi_2,\hat{A}\psi_1)=0 \tag{14.2.11}$$

故 $\hat{A}$ 一定是 Hermite 算符.

(3) Hermite 算符 $\hat{A}$ 的本征值λ_n 都是实数：设与本征值 λ_m 相应的本征函数为 ψ_m，即有

$$\hat{A}\psi_m=\lambda_m\psi_m \tag{14.2.12}$$

首先，总可以使 ψ_m归一化$(\psi_m,\psi_m)=1$. 上式两边取内积则有

$$\lambda_m=(\psi_m,\hat{A}\psi_m) \tag{14.2.13}$$

又取复共轭，由内积的性质得

$$\lambda_m^*=(\hat{A}\psi_m,\psi_m) \tag{14.2.14}$$

而 $\hat{A}$ 是 Hermite 算符，故由定义式(14.2.5)得到 $\lambda_m=\lambda_m^*$，因此 λ_m 为实数.

(4) 对应不同的本征值之本征函数彼此正交：设与本征值 λ_n 与 λ_m 相应的本征函数分别为 ψ_n 和 ψ_m，即有

$$\hat{A}\psi_n=\lambda_n\psi_n;\quad\hat{A}\psi_m=\lambda_m\psi_m \tag{14.2.15}$$

以 ψ_m 和 ψ_n 分别取式(14.2.15)第一和二式两边的内积

$$\lambda_n(\psi_m,\psi_n)=(\psi_m,\hat{A}\psi_n);\quad\lambda_m(\psi_n,\psi_m)=(\psi_n,\hat{A}\psi_m) \tag{14.2.16a}$$

第一式两边取复共轭，并利用 $\lambda_n=\lambda_n^*$ 得到

$$\lambda_n(\psi_n,\psi_m)=(\hat{A}\psi_n,\psi_m)=(\psi_n,\hat{A}\psi_m) \tag{14.2.16b}$$

与式(14.2.16a)中第二式相减应有

$$(\lambda_n-\lambda_m)(\psi_n,\psi_m)=0 \tag{14.2.17}$$

因 $\lambda_n\neq\lambda_m$，故$(\psi_n,\psi_m)=0$，即 ψ_n 与 ψ_m 正交.

(5) Hermite 算符 $\hat{A}$ 的本征函数系构成 Hilbert 空间中的一个完备系，因此 Hilbert 空间中任一矢量 ψ 可作广义展开

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n \tag{14.2.18}$$

其中 $c_n = (\psi_n, \psi)$. 上式在平均意义上收敛，即

$$\lim_{N\to\infty} \int \left| \psi(\boldsymbol{r}) - \sum_{n=0}^{N} c_n \psi_n(\boldsymbol{r}) \right|^2 \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = 0 \tag{14.2.19}$$

完备性证明比较复杂，故略去.

根据 Hilbert 空间中 Hermite 算符的以上特性，量子力学的基本假定为：

1. 微观系统的量子态对应于 Hilbert 空间中的一个矢量，称为**态矢量**；
2. 量子力学中的力学量用 Hilbert 空间中的一个线性 Hermite 算符表达.

例 14.2.1 一维动量算符

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \quad x \in (-\infty, \infty); \quad \psi \in L^2(-\infty, \infty) \tag{14.2.20}$$

解： 显然

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\right) \mathrm{d}x = -\mathrm{i}\hbar \psi_1^* \psi_2 \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2 \left(-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\right)^* \mathrm{d}x \tag{14.2.21}$$

对平方可积函数：ψ_1 和 $\psi_2 \to 0$（当 $x \to \pm\infty$ 时），于是

$$(\hat{p}_x \psi_1, \psi_2) = (\psi_1, \hat{p}_x \psi_2) \tag{14.2.22}$$

故 $\hat{p}_x$ 在 $(-\infty, +\infty)$ 区间上，对平方可积函数类是 Hermite 算符.

例 14.2.2 一维动能算符

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}, \quad \psi \in L^2(0, l), \quad \psi(0) = \psi(l) = 0 \tag{14.2.23}$$

解： 显然

$$\begin{aligned} (\psi_1, \hat{H}\psi_2) &= -\int_0^l \psi_1^* \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2 \psi_2}{\mathrm{d}x^2} \mathrm{d}x \\ &= -\int_0^l \psi_2 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2 \psi_1^*}{\mathrm{d}x^2} \mathrm{d}x = (\hat{H}\psi_1, \psi_2) \end{aligned} \tag{14.2.24}$$

因此 $\hat{H}$ 在函数类：$\psi \in L^2(0, l)$ 且 $\psi(0) = \psi(l)$ 中是 Hermite 算符. 本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2 \psi}{\mathrm{d}x^2} = \lambda \psi; \quad \psi(0) = \psi(l) = 0 \tag{14.2.25a}$$

求得本征函数和相应的本征值为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right); \quad \lambda_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ml^2} \quad (n = 1, 2\cdots) \tag{14.2.25b}$$

例 14.2.3 三维动能算符

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2; \quad \left(\alpha\psi + \beta \frac{\partial \psi}{\partial n}\right)\Big|_{\partial G} = 0, \quad \boldsymbol{r} \in G \tag{14.2.26}$$

解： $\hat{H}$ 定义在有限闭空间 G 内，G 的边界为 ∂G，进一步要求在 G 内 $\psi \in C^2$ 且在 ∂G 上 $\psi \in C^1$. 由 Green 公式

$$\int_G (\psi_1^* \nabla^2 \psi_2 - \psi_2 \nabla^2 \psi_1^*) \mathrm{d}\tau = \iint_{\partial G} \left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial n} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial n} \right) \mathrm{d}S \quad (14.2.27)$$

由式(14.2.26)中边界条件

$$\left(\alpha \psi_1^* + \beta \frac{\partial \psi_1^*}{\partial n} \right) \bigg|_{\partial G} = 0; \quad \left(\alpha \psi_2 + \beta \frac{\partial \psi_2}{\partial n} \right) \bigg|_{\partial G} = 0 \quad (14.2.28)$$

如果 α 与 β 不同时为零，故

$$\left(\psi_1^* \frac{\partial \psi_2}{\partial n} - \psi_2 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial n} \right) \bigg|_{\partial G} \equiv 0 \quad (14.2.29)$$

因此，由式(14.2.27)得到

$$\begin{aligned} (\psi_1, \hat{H}\psi_2) &= \int_G \psi_1^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_2 \mathrm{d}\tau \\ &= \int_G \psi_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi_1^* \mathrm{d}\tau = (\hat{H}\psi_1, \psi_2) \end{aligned} \quad (14.2.30)$$

故在相应的边界条件下 $\hat{H}$ 是 Hermite 算符.

14.3　力学量的测量、不确定关系和守恒量

既然量子力学中的力学量对应于一个线性 Hermite 算符，那么在任意一个量子态测量一个力学量有什么特性呢？为此进一步讨论力学量、算符以及量子态的关系.

1. 力学量有确定值的条件

设力学量 A 相应的 Hermite 算符为 $\hat{A}$，在量子态 ψ 中的平均值为

$$\langle A \rangle = \int_V \psi^*(\boldsymbol{r}, t) \hat{A} \psi(\boldsymbol{r}, t) \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \equiv (\psi, \hat{A}\psi) \quad (14.3.1)$$

而平均方差为

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \int_V \psi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \psi \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \quad (14.3.2)$$

利用 $\hat{A}$ 的厄米性，即$(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)$的厄米性，上式为

$$\begin{aligned} \langle (\Delta A^2 \rangle &= \int_V [(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi]^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \\ &= \int_V |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi|^2 \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \end{aligned} \quad (14.3.3)$$

如果 A 在量子态 ψ 中有确定值，要求$\langle (\Delta A)^2 \rangle = 0$，即要求

$$\hat{A}\psi = \langle \hat{A} \rangle \psi \quad (14.3.4)$$

比较方程(14.2.6),上式即为本征方程的定义.因此有结论:当且仅当 ψ 是 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的本征态时,力学量 A 才有确定值,而且这个确定值就是算符 $\hat{A}$ 的本征值.只有在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的本征态,力学量 A 才有确定值.

2. 任意量子态中力学量的测量值

设量子态 ψ 不是算符 $\hat{A}$ 的本征态,而算符 $\hat{A}$ 的本征态满足本征方程

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n \tag{14.3.5}$$

因为算符 $\hat{A}$ 的本征函数系构成 Hilbert 空间中的一个完备系,即任意量子态 ψ 可用 $\{\psi_n\}$ 展开

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n\psi_n \tag{14.3.6}$$

因此力学量 A 的平均值为

$$\langle A\rangle = \int_V \psi^* \hat{A}\psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \sum_{n,m=0}^{\infty} C_n^* C_m \int_V \psi_n^* \hat{A}\psi_m \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{14.3.7a}$$

即

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_{n,m=0}^{\infty} C_n^* C_m A_m \int_V \psi_n^* \psi_m \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \sum_{n,m=0}^{\infty} C_n^* C_m A_m \delta_{nm} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} A_n \mid C_n \mid^2 \end{aligned} \tag{14.3.7b}$$

因此得到结论:在量子态 ψ(非 $\hat{A}$ 的本征态)中测量力学量 A 有各种可能值,这些可能值就是 $\hat{A}$ 的本征值 A_n,而且可能值 A_n 出现的概率为 $|C_n|^2 = |(\psi_n,\psi)|^2$.

3. 不同力学量同时有确定值的条件

若 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 在量子态 ψ 都有确定值,ψ 一定是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态,即

$$\hat{A}\psi = a\psi; \quad \hat{B}\psi = b\psi \tag{14.3.8}$$

第一式左乘 $\hat{B}$、第二式左乘 $\hat{A}$ 得到

$$\hat{B}\hat{A}\psi = a\hat{B}\psi = ab\psi; \quad \hat{A}\hat{B}\psi = b\hat{A}\psi = ab\psi$$

即

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\psi = 0 \tag{14.3.9}$$

从上式我们还不能说 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易,因为算符对易的条件是对任意的波函数 φ 都成立 $(\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B})\varphi=0$.可以证明:如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数构成 Hilbert 空间上的完备系,那么 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易,即 $[\hat{A},\hat{B}]=0$.事实上,因为任意的波函数 φ 都可用共同本征函数 $\{\psi_n\}$ 来展开

$$(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})\psi_n = 0 \tag{14.3.10}$$

由于 φ 是任意的波函数，因此必有 $[\hat{A},\hat{B}]=0$. 故不同力学量同时有确定值的条件是相应的算符对易且在它们共同的本征态.

反过来，可以证明：如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，那么 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 必存在共同本征函数构成 Hilbert 空间上的完备系. 事实上，如 ψ_n 是 $\hat{A}$ 的本征函数

$$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n \tag{14.3.11}$$

那么用 $\hat{B}$ 左乘(14.3.11)式得到

$$\hat{B}\hat{A}\psi_n = \hat{A}(\hat{B}\psi_n) = a_n(\hat{B}\psi_n) \tag{14.3.12}$$

可见 $\hat{B}\psi_n$ 也是 $\hat{A}$ 的本征函数且相应的本征值也是 a_n，假定 $\hat{A}$ 的本征函数无简并(有简并时问题复杂一点而已)，$\hat{B}\psi_n$ 与 ψ_n 一定描述同一个态，二者至多差一个常数，即 $\hat{B}\psi_n=b\psi_n$. 因此 $\{\psi_n\}$ 是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征函数系. 由于 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是 Hermite 算符，故 $\{\psi_n\}$ 构成 Hilbert 空间上的完备系. 值得说明的是：

(1) 即使 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易且存在完备的共同本征函数系，但当 $\hat{A}$ 的本征函数简并时，它不一定是 $\hat{B}$ 的本征函数，需要对属于同一个本征值的本征函数重新作线性组合，才能得到 $\hat{B}$ 的本征函数；

(2) 当 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易时，它们的共同本征态特性显然不仅由 $\hat{A}$，而且也由 $\hat{B}$ 确定. 因此，要完全确定体系的状态，需要一组相互对易的力学量. 由这组力学量的本征值或量子数来确定体系所处的状态. 如果这组力学量能够完全确定体系的状态，那么称这组力学量为力学量的**完全集**. 完全集的力学量数目与体系的自由度相同. 注意：经典力学中确定一个力学系统的状态，必须同时给出广义坐标和广义动量(即相空间的一个点的坐标)，因而给出的力学量数目是自由度的二倍. 例如为确定一个自由质点的运动状态(自由度数为 3)，初始条件是 $t=0$ 时刻的位置矢量和速度矢量，有 6 个分量. 其原因是：牛顿力学方程或者 Lagrange 方程对时间的导数是二阶的，而 Schrödinger 方程是一阶的微分方程.

例 14.3.1　$(\hat{L}^2,\hat{L}_z)$ 的共同本征函数.

解：　角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 的分量形式为

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
\hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -\mathrm{i}\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
\hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)
\end{aligned} \tag{14.3.13}$$

利用球坐标，可以把角动量算符的分量表示成

$$\hat{L}_x = \mathrm{i}\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$
$$\hat{L}_y = \mathrm{i}\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{14.3.14}$$
$$\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

而角动量平方算符

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{14.3.15}$$

显然 $\hat{L}_z$ 的本征方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} = L_z\Phi \tag{14.3.16}$$

不难得到上式的解为

$$\Phi(\varphi) = \exp\left[\mathrm{i}\frac{L_z}{\hbar}\varphi\right] \tag{14.3.17}$$

而 $\Phi(\varphi)$ 必须满足周期性边界条件：$\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi)$，故

$$\frac{L_z}{\hbar} = m \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{14.3.18}$$

于是 $\hat{L}_z$ 的本征值为

$$L_z = m\hbar \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{14.3.19}$$

相应的归一化本征函数由方程(13.4.9)表示. 再看 $\hat{L}^2$ 的本征值问题：本征方程为

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\vartheta,\varphi) = L^2 Y(\vartheta,\varphi) \tag{14.3.20}$$

令分离变量解 $Y(\vartheta,\varphi)=\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$ 代入上式得到

$$\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\vartheta}\right) + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{\nu}{\sin^2\vartheta}\right)\Theta = 0 \tag{14.3.21}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} + \nu\Phi = 0 \tag{14.3.22}$$

显然上二式与方程(13.4.6)和(13.4.7)完全一样. 故方程(14.3.20)的解即为式(13.4.14a)，而从方程(13.4.11)可得角动量平方的本征值为

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad (l = 0, 1, 2\cdots) \tag{14.3.23}$$

注意：这里对量子数 l 没有限制. 相应的本征函数为球谐函数 $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\exp(\mathrm{i}m\varphi) \tag{14.3.24}$$

显然 $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ 就是 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征函数. 可见对磁量子数仍有限制：$m=0, \pm1, \pm2, \cdots, \pm l$. 由方程(14.3.23)，量子数 l 与角动量有关，故称为**角动量量子数**. 因此氢原子的量子态由一组量子数(n, l, m)确定，这组量子数对应的力学量为

能量 H、角动量的平方 L^2 及角动量的分量 L_z.

例 14.3.2　求对称陀螺的所有能级.

解:由式(2.2.17),在主轴坐标系内

$$H=\frac{1}{2}\left(\frac{J_x^2}{I_1}+\frac{J_y^2}{I_2}+\frac{J_z^2}{I_3}\right)=\frac{1}{2I}(J_x^2+J_y^2)+\frac{1}{2}\frac{J_z^2}{I_3}$$

$$=\frac{1}{2I}J^2+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3}-\frac{1}{I}\right)J_z^2 \tag{14.3.25}$$

因 J^2 是刚体角动量的平方,是空间角动量(与第 16 章介绍的自旋角动量不同). 由 14.1 节的讨论,方程(14.3.19)和(14.3.23)可推广到一般的角动量

$$\begin{aligned} J^2 &= j(j+1)\hbar^2 \quad (j=0,1,2,\cdots) \\ J_z &= m\hbar \quad (m=0,\pm 1,\pm 2,\cdots,\pm j) \end{aligned} \tag{14.3.26}$$

故量子化能级为

$$E_{lm}=\frac{1}{2I}j(j+1)\hbar^2+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{I_3}-\frac{1}{I}\right)m^2\hbar^2 \tag{14.3.27}$$

4. 不确定原理

我们知道,当 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易时,在 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态,力学量 A 和 B 有确定值且确定值为 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的本征值. 问题是,如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不对易且在任意的量子态 ψ 中,力学量 A 和 B 的测量值有什么关系呢? 为此构造积分

$$I(\xi)=\int_V |\xi\hat{A}\psi-\mathrm{i}\hat{B}\psi|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\geqslant 0 \tag{14.3.28}$$

式中 ξ 是实参数,ψ 是任意的量子态. 上式展开后得到

$$\begin{aligned} I(\xi)=&\int_V(\xi\hat{A}^*\psi^*+\mathrm{i}\hat{B}^*\psi^*)(\xi\hat{A}\psi+\mathrm{i}\hat{B}\psi)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ =&\ \xi^2\int_V(\hat{A}^*\psi^*)(\hat{A}\psi)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &-\mathrm{i}\xi\int_V[(\hat{A}^*\psi^*)(\hat{B}\psi)-(\hat{B}^*\psi^*)(\hat{A}\psi)]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &+\int_V(\hat{B}^*\psi^*)(\hat{B}\psi)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \end{aligned} \tag{14.3.29}$$

由 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的 Hermite 性得到

$$\begin{aligned} I(\xi)=&\ \xi^2\int_V\psi^*\hat{A}^2\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\xi\int_V\psi^*(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &+\int_V\psi^*\hat{B}^2\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\xi^2\langle\hat{A}^2\rangle+\xi\langle\hat{C}\rangle+\langle\hat{B}^2\rangle\geqslant 0 \end{aligned} \tag{14.3.30}$$

其中$(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})=\mathrm{i}\hat{C}$. 上式为 ξ^2 的二次式,正定条件为

$$\langle\hat{A}^2\rangle\langle\hat{B}^2\rangle\geqslant\frac{\langle\hat{C}\rangle^2}{4} \tag{14.3.31}$$

即

$$\sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle} \geqslant \frac{|\langle \hat{C} \rangle|}{2} = \frac{1}{2} |\langle \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \rangle| \tag{14.3.32}$$

令 $\Delta\hat{A}=\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$ 和 $\Delta\hat{B}=\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$，显然如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是 Hermite 算符，那么 $\Delta\hat{A}$ 和 $\Delta\hat{B}$ 也是 Hermite 算符且满足关系：$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]=[\hat{A},\hat{B}]$. 作变换

$$\Delta\hat{A} \rightarrow \hat{A}, \quad \Delta\hat{B} \rightarrow \hat{B}$$

则式(14.3.32)变成

$$\sqrt{\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle} \geqslant \frac{1}{2} |\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} \rangle| = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}] = \frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}] \tag{14.3.33}$$

这是任意两个 Hermite 算符的一般不确定关系. 取 $\hat{A}=x_\alpha$ 和 $\hat{B}=\hat{p}_\sigma$，由方程(14.1.20)和上式得到

$$\sqrt{\langle (\Delta x_\alpha)^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p}_\sigma)^2 \rangle} \geqslant \frac{\hbar}{2}\delta_{\alpha\sigma} \tag{14.3.34}$$

如取 $\hat{A}=\hat{E}=\mathrm{i}\hbar\partial/\partial t$ 和 $\hat{B}=t$，由 $[\hat{E},t]=\mathrm{i}\hbar$ 得到

$$\sqrt{\langle (\Delta E)^2 \rangle \langle (\Delta t)^2 \rangle} \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{14.3.35}$$

(14.3.34)和(14.3.35)式也简写成

$$\Delta x_\alpha \cdot \Delta p_\sigma \geqslant \frac{\hbar}{2}\delta_{\alpha\sigma}; \quad \Delta E \cdot \Delta t \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{14.3.36}$$

5. 力学量平均值随时间的变化

由方程(14.3.1)得到

$$\frac{\mathrm{d}\langle A \rangle}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t},\hat{A}\psi\right) + \left(\psi,\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) \tag{14.3.37}$$

利用 Schrödinger 方程和 Hermite 性，上式变为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle A \rangle}{\mathrm{d}t} &= \left(\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar},\hat{A}\psi\right) + \left(\psi,\hat{A}\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar}\right) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) \\ &= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi,\hat{H}\hat{A}\psi) + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi,\hat{A}\hat{H}\psi) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi,[\hat{A},\hat{H}]\psi) + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]} + \left(\psi,\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\right)\end{aligned} \tag{14.3.38}$$

如果 $\hat{A}$ 不显含时间，那么

$$\frac{\mathrm{d}\langle A \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{A},\hat{H}]} \tag{14.3.39}$$

因此如果力学量 A 的算符 $\hat{A}$ 与体系的 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 对易：$[\hat{A},\hat{H}]=0$，这个力学量的平均值不随时间变化，称为体系的**守恒量**. 可以证明：如果力学量 A 是一个守恒量，那么在任意一个量子态 ψ 测量力学量 A 的概率分布不随时间变化. 事实上，因为 $\hat{A}$ 与 $\hat{H}$ 对易，它们有共同的完备本征函数系 $\{\psi_k\}$

$$\hat{H}\psi_k = E_k\psi_k;\quad \hat{A}\psi_k = A_k\psi_k \tag{14.3.40}$$

任意一个量子态 ψ 可作展开

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r});\quad C_k(t) = (\psi_k,\psi) \tag{14.3.41}$$

在 t 时刻，测量力学量 A 得到 A_k 的概率为 $|C_k(t)|^2$，而

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|C_k(t)|^2 &= \frac{\mathrm{d}C_k^*(t)}{\mathrm{d}t}C_k(t) + c.c. = \left(\frac{\partial\psi}{\partial t},\psi_k\right)(\psi_k,\psi) + c.c.\\ &= \left(\frac{\hat{H}\psi}{\mathrm{i}\hbar},\psi_k\right)(\psi_k,\psi) + c.c. = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi,\hat{H}\psi_k)(\psi_k,\psi) + c.c.\\ &= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\psi,E_k\psi_k)(\psi_k,\psi) + c.c. = -\frac{E_k}{\mathrm{i}\hbar}|(\psi,\psi_k)|^2 + c.c. = 0\end{aligned} \tag{14.3.42}$$

(14.3.42)式中第四个等号利用了 $\hat{H}$ 的 Hermite 性质. 因此守恒量在任意一个量子态，平均值和概率分布不随时间变化！注意：守恒量与定态的区别. 定态是 Hamilton 算符的本征态，即能量本征态，在定态中一切力学量的平均值和概率分布不随时间变化；而守恒量在一切量子态中平均值和概率分布不随时间变化. 若初始时刻体系处于一个守恒量的本征态，则体系保持在该本征态. 由于守恒量有此优点，它的量子数称为好量子数. 反之，如果初始时刻体系并不处于一个守恒量的本征态，则以后的状态也不可能是那个守恒量的本征态，但守恒量的平均值和测量概率的分布不随时间变化.

例 14.3.3　证明自由粒子的动量守恒，有心力场中粒子的角动量守恒.

解：　自由粒子的 Hamilton 算符和动量算符分别为

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2;\quad \hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{14.3.43}$$

显然

$$[\hat{H},\hat{\boldsymbol{p}}] = \left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m},\hat{\boldsymbol{p}}\right] = 0 \tag{14.3.44}$$

故动量 $\boldsymbol{p}$ 是守恒量；粒子在有心力场中运动的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}= \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+U(r)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}+U(r)$$

由式(14.3.14)，角动量算符仅对(ϑ,φ)作用，而与r无关；又由式(14.1.25)，三个分量与$\hat{L}^2$对易，显然有

$$[\hat{L}^2,\hat{H}]=0;\quad [\hat{L}_x,\hat{H}]=[\hat{L}_y,\hat{H}]=[\hat{L}_z,\hat{H}]=0 \qquad (14.3.45)$$

故粒子在有心力场中，角动量平方与三个分量都是守恒量.

14.4 算符的矩阵形式、表象变换和密度矩阵

既然量子态是 Hilbert 空间的一个矢量，就可以用 Hilbert 空间上的一组正交、归一和完备的基函数展开. 而如前所述，定义在 Hilbert 空间上的 Hermite 算符的本征函数具有这样的性质. 因此任意一个态矢量可以用 Hermite 算符的本征函数展开. 显然可能有多个这样的 Hermite 算符，故可以选择不同的基函数来展开. 问题是：这些不同的展开表达式有什么关系呢？

设线性 Hermite 算符$\hat{A}$有一组正交、归一和完备的本征函数系$\{\psi_k\}(k=1,2,\cdots)$，满足方程

$$\hat{A}\psi_k=\lambda_k\psi_k \qquad (14.4.1)$$

对任意一个量子态矢量ψ存在展开

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{k=1}^{\infty}a_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r});\quad a_k(t)=(\psi_k,\psi) \qquad (14.4.2)$$

因此对给定的基函数$\{\psi_k\}$，可以把展开式写成列矩阵，则态矢量ψ可表示为

$$\psi=[a_1,a_2,\cdots,a_k,\cdots]^{\mathrm{T}}\equiv\boldsymbol{a} \qquad (14.4.3)$$

上式为了书写方便，把列矩阵写成行矩阵的转置形式. ψ的共轭矩阵为

$$\psi^{\dagger}=[a_1^*,a_2^*,\cdots,a_k^*,\cdots]\equiv\boldsymbol{a}^{\dagger} \qquad (14.4.4)$$

称式(14.4.3)为态矢量ψ在$\hat{A}$表象中的表示. 所谓$\hat{A}$表象，就是 Hilbert 空间的基矢量选$\hat{A}$的本征函数系.

任意一个线性算符$\hat{O}$也可以在$\hat{A}$表象中用矩阵表示. 设$\hat{O}$作用到ψ上后变成ψ'，即

$$\psi'=\hat{O}\psi \qquad (14.4.5)$$

假定ψ'也是 Hilbert 空间上的一个矢量，则ψ'也可展开成

$$\psi'=\sum_{k=1}^{\infty}b_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r});\quad b_k(t)=(\psi_k,\psi') \qquad (14.4.6)$$

代入式(14.4.5)后得到

$$\sum_{k=1}^{\infty} b_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r}) = \hat{O}\psi = \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t)\hat{O}\psi_k(\boldsymbol{r}) \tag{14.4.7}$$

两边用 ψ_l 取内积且注意到$(\psi_l,\psi_k)=\delta_{lk}$

$$b_k(t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t)(\psi_l,\hat{O}\psi_k) = \sum_{k=1}^{\infty} O_{lk}a_k(t) \tag{14.4.8}$$

其中

$$O_{lk} = (\psi_l,\hat{O}\psi_k) \tag{14.4.9}$$

以 b_k 形成列矩阵：$\boldsymbol{b}=[b_1,b_2,\cdots,b_k,\cdots]^{\mathrm{T}}$，$O_{lk}$ 形成方阵 $\boldsymbol{O}$，方程(14.4.8)可写成矩阵相乘的形式

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{O}\boldsymbol{a} \tag{14.4.10}$$

于是，在 $\hat{A}$ 表象中，我们得到

(1) $\hat{O}$ 相对应的力学量 O 的平均值：

$$\langle O\rangle = \int_V \psi^*(\boldsymbol{r},t)\hat{O}\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \sum_{m,n} a_m^*(t)O_{mn}a_n(t) = \boldsymbol{a}^{\dagger}\boldsymbol{O}\boldsymbol{a} \tag{14.4.11}$$

(2) $\hat{O}$ 的本征方程的矩阵形式：设 $\hat{O}$ 的本征方程为 $\hat{O}\phi=\lambda\phi$，作展开

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n(t)\psi_n(\boldsymbol{r}) \tag{14.4.12}$$

代入 $\hat{O}\phi=\lambda\phi$ 得到

$$\hat{O}\phi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n(t)\hat{O}\psi_n(\boldsymbol{r}) = \lambda\sum_{n=1}^{\infty} d_n(t)\psi_n(\boldsymbol{r}) \tag{14.4.13}$$

两边用 ψ_m 取内积

$$\sum_{n=1}^{\infty} d_n(t)O_{mn} = \lambda d_m(t) \quad (m=1,2,\cdots) \tag{14.4.14}$$

写成矩阵形式即为

$$\boldsymbol{O}\boldsymbol{d} = \lambda\boldsymbol{d} \tag{14.4.15}$$

即本征值满足

$$\det|O_{mn} - \lambda\delta_{mn}| = 0 \tag{14.4.16}$$

故在 $\hat{A}$ 表象中，任意线性算符 $\hat{O}$ 的本征值问题化成求矩阵的本征值. 特别要指出的是：如果 $\hat{O}$ 就是算符 $\hat{A}$ 本身，即 $\hat{O}$ 在自身的表象中，由式(14.4.9)

$$O_{lk} = (\psi_l,\hat{O}\psi_k) = \lambda_k\delta_{lk} \tag{14.4.17}$$

因此算符在自身的表象中，矩阵为对角矩阵.

(3) Schrödinger 方程的形式：对任意的态矢量 ψ 作展开

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{k=1}^{\infty}a_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r}) \tag{14.4.18}$$

代入 Schrödinger 方程得到

$$\mathrm{i}\hbar\sum_k\frac{\mathrm{d}a_k(t)}{\mathrm{d}t}\psi_k=\sum_k a_k(t)\hat{H}\psi_k \tag{14.4.19}$$

两边用 ψ_m 取内积

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_k a_k(t)(\psi_m,\hat{H}\psi_k)\equiv\sum_k H_{mk}a_k(t) \tag{14.4.20}$$

写成矩阵形式即为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{a}=\boldsymbol{Ha} \tag{14.4.21}$$

其中矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的元为 $H_{mk}=(\psi_m,\hat{H}\psi_k)$. 如果 $\hat{A}$ 就是 Hamilton 算符 $\hat{H}$,即在能量表象中,我们有 $H_{mk}=(\psi_m,\hat{H}\psi_k)=E_k\delta_{mk}$,方程(14.4.20)简化为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_k(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_k H_{mk}a_k(t)=E_ka_k(t) \tag{14.4.22}$$

立即可以得到

$$a_k(t)=a_k(0)\exp\left(\frac{E_k}{\mathrm{i}\hbar}t\right) \tag{14.4.23}$$

例 14.4.1 二分量算符.

解: 考虑一个特殊的算符 $\hat{S}_z$,它的本征值只有两个:λ 和 $-\lambda$. 我们来讨论在 $\hat{S}_z$ 的自身表象中算符 $\hat{S}_z$ 的形式. 由方程(14.4.9)

$$O_{lk}=(\psi_l,\hat{O}\psi_k)=(\psi_l,\hat{S}_z\psi_k)=\lambda_k(\psi_l,\psi_k)=\lambda_k\delta_{lk} \tag{14.4.24}$$

因本征值只有两个,故 $k,l=1,2$,即 $O_{12}=O_{21}=0$,$O_{11}=\lambda$ 和 $O_{22}=-\lambda$,所以 $\hat{S}_z$ 在自身表象的矩阵表示为

$$\hat{S}_z=\lambda\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix} \tag{14.4.25}$$

(14.4.25)式在第 16 章讨论电子自旋时有用.

算符的表象变换:设算符 $\hat{O}$ 在 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 表象中分别具有形式

$$O_{mn}=(\psi_m,\hat{O}\psi_n);\quad O'_{\alpha\sigma}=(\varphi_\alpha,\hat{O}\varphi_\sigma) \tag{14.4.26}$$

其中$\{\psi_m\}$和$\{\varphi_\alpha\}$$(m,\alpha=1,2,\cdots)$分别是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的本征函数系. 那么 O_{mn}与$O'_{\alpha\sigma}$有什么关系呢? 显然可以把 φ_α 用$\{\psi_m\}$来展开,即

$$\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})=\sum_{n=1}^{\infty}S_{n\alpha}\psi_n(\boldsymbol{r});\quad\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{r})=\sum_{n=1}^{\infty}S_{n\alpha}^*\psi_n^*(\boldsymbol{r}) \tag{14.4.27}$$

式中 $S_{n\alpha}=(\psi_n,\varphi_\alpha)$；$S_{n\alpha}^*=(\varphi_\alpha,\psi_n)$. 因为$\{\varphi_\alpha\}$也是正交、归一和完备的本征函数集，故由上式

$$\delta_{\alpha\sigma}=(\varphi_\alpha,\varphi_\sigma)=\sum_{n,m=1}^{\infty}S_{n\alpha}^*S_{m\sigma}\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\psi_m(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\sum_{n,m=1}^{\infty}S_{n\alpha}^*S_{m\sigma}\delta_{nm}=\sum_{n=1}^{\infty}S_{n\alpha}^*S_{n\sigma}\tag{14.4.28}$$

定义矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的元为 $S_{n\sigma}$，它的共轭转置矩阵为 $\boldsymbol{S}^\dagger$，那么上式可以写成矩阵形式

$$\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{S}=\boldsymbol{I}\tag{14.4.29}$$

同样可以证明 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^\dagger=\boldsymbol{I}$. 事实上，

$$\sum_{\alpha=1}^{\infty}S_{n\alpha}S_{m\alpha}^*=\sum_{\alpha=1}^{\infty}\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\cdot\int_V\psi_m(\boldsymbol{r}')\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\tag{14.4.30}$$

将 ψ_m 用$\{\varphi_\alpha\}$展开

$$\psi_m(\boldsymbol{r})=\sum_{\gamma=1}^{\infty}c_{\gamma m}\varphi_\gamma(\boldsymbol{r})\tag{14.4.31}$$

代入式(14.4.30)得到

$$\sum_{\alpha=1}^{\infty}S_{n\alpha}S_{m\alpha}^*=\sum_{\alpha=1}^{\infty}\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\cdot\int_V\sum_{\gamma=1}^{\infty}c_{\gamma m}\varphi_\gamma(\boldsymbol{r}')\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$=\sum_{\alpha=1}^{\infty}\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\cdot\sum_{\gamma=1}^{\infty}c_{\gamma m}\int_V\varphi_\gamma(\boldsymbol{r}')\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$=\sum_{\alpha=1}^{\infty}\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\cdot\sum_{\gamma=1}^{\infty}c_{\gamma m}\delta_{\alpha\gamma}$$

$$=\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\sum_{\alpha=1}^{\infty}c_{\alpha m}\varphi_\alpha(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_V\psi_n^*(\boldsymbol{r})\psi_m(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\delta_{nm}$$

即 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^\dagger=\boldsymbol{I}$. 故 $\boldsymbol{S}$ 的逆矩阵为 $\boldsymbol{S}^\dagger$，即 $\boldsymbol{S}^\dagger=\boldsymbol{S}^{-1}$. 满足条件式(14.4.29)的矩阵称为**酉矩阵**. 显然，矩阵 $\boldsymbol{S}$ 建立了 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 表象的联系. 在 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 表象中

$$O'_{\alpha\beta}=(\varphi_\alpha,\hat{O}\varphi_\beta)=\int_V\varphi_\alpha^*(\boldsymbol{r})\hat{O}\varphi_\beta(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int_V\sum_{m=1}^{\infty}S_{m\alpha}^*\psi_m^*(\boldsymbol{r})\cdot\sum_{n=1}^{\infty}S_{n\beta}\hat{O}\,\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\sum_{m,n=1}^{\infty}S_{m\alpha}^*S_{n\beta}\int_V\psi_m^*(\boldsymbol{r})\hat{O}\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\sum_{m,n=1}^{\infty}S_{m\alpha}^*S_{n\beta}O_{mn}\tag{14.4.32}$$

因此算符 $\hat{O}$ 在 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 表象中关系为

$$\boldsymbol{O}'=\boldsymbol{S}^\dagger\boldsymbol{O}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{O}\boldsymbol{S}\tag{14.4.33}$$

波函数的表象变换：考察任意波函数 ψ，在 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 表象中分别展开为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{k=1}^{\infty}a_k(t)\psi_k(\boldsymbol{r});\quad \psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{k=1}^{\infty}b_k(t)\varphi_k(\boldsymbol{r}) \tag{14.4.34}$$

显然

$$\begin{aligned}b_k(t)&=(\varphi_k,\psi)=\int_V\varphi_k^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int_V\sum_{m=1}^{\infty}S_{mk}^*\psi_m^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&=\sum_{m=1}^{\infty}S_{mk}^*\int_V\psi_m^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\sum_{m=1}^{\infty}S_{mk}^*a_m(t)\end{aligned}$$

写成矩阵的形式即为

$$\boldsymbol{b}=\boldsymbol{S}^{\dagger}\boldsymbol{a}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{a} \tag{14.4.35}$$

表象变换与线性代数中矢量用不同的基矢量表示类似. 主要的区别是表象变换在 Hilbert 空间进行,矩阵和基矢量都是无限维的.

密度矩阵:利用密度矩阵,可以得到求力学平均值的另一简洁表示,它的优点在于在求力学量平均值过程中,波函数相位的不确定影响较小.

首先考虑 $\hat{A}$ 表象中波函数的矩阵表示式(14.4.3)和(14.4.4). 显然

$$\boldsymbol{a}^{\dagger}\boldsymbol{a}=\sum_{k=1}|a_k(t)|^2=1 \tag{14.4.36}$$

为态矢量 ψ 的归一化条件. 而 $\boldsymbol{aa}^{\dagger}$ 形成一个矩阵

$$\begin{aligned}\hat{\rho}\equiv\boldsymbol{aa}^{\dagger}&=[a_1,a_2,\cdots,a_k,\cdots]^{\mathrm{T}}[a_1^*,a_2^*,\cdots,a_k^*,\cdots]\\&=\begin{bmatrix}|a_1|^2 & a_1a_2^* & a_1a_3^* & \cdots\\ a_2a_1^* & |a_2|^2 & a_2a_3^* & \cdots\\ a_3a_1^* & a_3a_2^* & |a_3|^2 & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{bmatrix}.\end{aligned} \tag{14.4.37}$$

$\hat{\rho}$ 称为**密度矩阵算符**,其矩阵元为

$$\rho_{mn}=a_m(t)a_n^*(t) \tag{14.4.38}$$

于是力学量 O 的平均值

$$\begin{aligned}\langle O\rangle&=\int_V\psi^*(\boldsymbol{r},t)\hat{O}\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\sum_{m,n}a_m^*(t)O_{mn}a_n(t)\\&=\sum_{m,n}\rho_{nm}O_{mn}=\sum_{n}(\hat{\rho}\hat{O})_{nn}=\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{O})\end{aligned} \tag{14.4.39}$$

如果 $\hat{O}$ 就是算符 $\hat{A}$ 本身,即 $\hat{O}$ 在自身的表象中,由式(14.4.17)

$$O_{mn}=(\psi_m,\hat{O}\psi_n)=\lambda_n\delta_{mn} \tag{14.4.40}$$

式(14.4.39)变成

$$\langle O\rangle=\sum_{m,n}\rho_{nm}\lambda_n\delta_{mn}=\sum_{n}\rho_{nn}\lambda_n=\sum_{n}\lambda_n|a_n(t)|^2 \tag{14.4.41}$$

Dirac 符号:用 Dirac 符号表示一个量子态 ψ

$$\psi=|\psi\rangle \tag{14.4.42}$$

以及 ψ 的共轭量子态

$$\psi^{\dagger} = \langle\psi| \tag{14.4.43}$$

分别称为**右矢和左矢**. 引起 Dirac 符号后，本征方程和归一化条件可写成

$$\hat{A}\ |k\rangle = \lambda_k\ |k\rangle;\quad \langle k\,|k\rangle = 1 \tag{14.4.44}$$

其中 $|k\rangle$ 表示第 k 个本征态. 任意量子态按 $\hat{A}$ 的本征矢（即基矢量 $|k\rangle$）展开，可表示为

$$|\psi\rangle = \sum_k a_k\ |k\rangle \tag{14.4.45}$$

展开系数为 $a_k = \langle k|\psi\rangle$，故

$$|\psi\rangle = \sum_k\ |k\rangle\langle k|\psi\rangle \equiv \sum_k \hat{P}_k\ |\psi\rangle \tag{14.4.46}$$

其中定义投影算符 $\hat{P}_k$ 为

$$\hat{P}_k = |k\rangle\langle k| \tag{14.4.47}$$

它对任何态矢量的运算相当于把这个态矢量投影到基矢量 $|k\rangle$ 上去，变成在基矢量 $|k\rangle$ 方向的投影，即

$$\hat{P}_k\psi = |k\rangle\langle k|\psi\rangle = a_k\ |k\rangle \tag{14.4.48}$$

由方程(14.4.46)，封闭性条件可写成

$$\sum_k\ |k\rangle\langle k| = \sum_k \hat{P}_k = \hat{I} \tag{14.4.49}$$

注意：如果 $|k\rangle$ 用矩阵表示，在 $\hat{A}$ 表象中，$|k\rangle$ 为列矩阵（只有 1 列），而 $\langle k|$ 为 $|k\rangle$ 的共轭矩阵

$$|k\rangle = [0,0,\cdots,1,\cdots,0,0,\cdots]^{\mathrm{T}};\quad \langle k| = [0,0,\cdots,1,\cdots,0,0,\cdots] \tag{14.4.50}$$

Schrödinger 方程(14.4.20)也可用 Dirac 符号十分方便地表达出来

$$\mathrm{i}\hbar\,\frac{\mathrm{d}\langle k\ |\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \sum_m \langle m|\psi\rangle\langle k|\ \hat{H}\ |m\rangle \tag{14.4.51}$$

其中矩阵元为 $H_{km} = (\psi_k, \hat{H}\psi_m) = \langle k|\hat{H}|m\rangle$.

密度矩阵元

$$\begin{aligned}\rho_{mn} &= a_m(t)a_n^*(t) = (\psi_m,\psi)(\psi_n,\psi)^* \\ &= (\psi_m,\psi)(\psi,\psi_n) = \langle m|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle\end{aligned} \tag{14.4.52}$$

因此量子态 ψ 的密度矩阵可表示为

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{14.4.53}$$

Dirac 符号的引进不仅仅带来了方便，它的意义更在于：用 Dirac 符号表示的态矢量与具体的表象无关. 否则，必须说明所得结果的具体表象. 本书的讨论主要

集中在坐标表象. 为了直观，尽量不用 Dirac 符号.

14.5　量子体系的对称性和守恒量

由 14.3 节讨论，如果力学量 A 的算符 $\hat{A}$ 与体系的 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 对易 $[\hat{A},\hat{H}]=0$，则 A 为守恒量. 与经典力学(见 5.5 节)类似，我们来讨论守恒量与量子体系对称性的关系. 一个体系的量子态 ψ 随时间的演化满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{14.5.1}$$

设体系在某种空间变换 $\hat{Q}$(非奇异且不含时间 t)作用下，波函数的变换为

$$\psi\to\psi'=\hat{Q}\psi;\quad \psi=\hat{Q}^{-1}\psi' \tag{14.5.2}$$

体系在变换 $\hat{Q}$ 作用下的不变性(或对称性)表现在：量子态 ψ 和 ψ' 遵守同样的动力学规律，即

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t}=\hat{H}\psi' \tag{14.5.3}$$

式(14.5.2)代入上式得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{Q}\psi)=\hat{H}(\hat{Q}\psi) \tag{14.5.4}$$

用 $\hat{Q}^{-1}$ 作用上式得到

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{Q}^{-1}\hat{H}(\hat{Q}\psi)=\hat{H}\psi \tag{14.5.5}$$

故要求 $\hat{Q}^{-1}\hat{H}\hat{Q}=\hat{H}$，或者 $\hat{H}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{H}=0$，即 $\hat{Q}$ 与 Hamilton 算符对易. 下面考虑空间变换 $\hat{Q}$ 为无限小平移和转动算符.

1. 空间平移不变性与动量守恒：在空间平移 $\delta\boldsymbol{r}=\boldsymbol{\varepsilon}$ 时，波函数的变化为

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r})\to\psi(\boldsymbol{r}-\delta\boldsymbol{r})&\approx\psi(\boldsymbol{r})-(\delta\boldsymbol{r}\cdot\nabla)\psi(\boldsymbol{r})\\&=(1-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla)\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{14.5.6}$$

其中 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为无限小常矢量. 可见无限小平移算符为

$$\hat{Q}=1-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla \tag{14.5.7}$$

如果体系具有平移不变性(如不存在外场)，那么 $\hat{Q}$ 与 Hamilton 算符对易，即 $\hat{H}$ 与 ∇ 对易. 显然算符 ∇ 与动量算符相联系 $\boldsymbol{p}=-i\hbar\nabla$. 可见，体系的空间平移不变性导致了动量守恒.

2. 空间转动不变性与动量矩守恒：在空间转动 $\delta\boldsymbol{r}=\delta\boldsymbol{\vartheta}\times\boldsymbol{r}$ 时，波函数的变化为

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}) \to \psi(\boldsymbol{r}-\delta\boldsymbol{r}) &= \psi(\boldsymbol{r}-\delta\boldsymbol{\vartheta}\times\boldsymbol{r})\\ &\approx \psi(\boldsymbol{r}) - [(\delta\boldsymbol{\vartheta}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}]\psi(\boldsymbol{r})\\ &= \psi(\boldsymbol{r}) - \delta\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla})\psi(\boldsymbol{r})\\ &= [1-\delta\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla})]\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{14.5.8}$$

可见无限小转动算符为

$$\hat{Q} = 1-\delta\boldsymbol{\vartheta}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}) \tag{14.5.9}$$

如果体系具有空间转动不变性(如不存在外场),那么 $\hat{Q}$ 与 Hamilton 算符对易,即 $\hat{H}$ 与 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}$ 对易. 显然算符 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}$ 与动量矩算符相联系 $\boldsymbol{L}=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}$. 可见,体系的空间转动不变性导致了动量矩守恒.

3. 空间反演不变性与宇称守恒:动量和动量矩都有经典力学量对应,而宇称没有经典对应的力学量,它是体系具有空间反演对称性时的守恒量. 在空间反演时,波函数的变化为

$$\psi(\boldsymbol{r}) \to \psi(-\boldsymbol{r}) \equiv \hat{I}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{14.5.10}$$

如果体系具有反演不变性,那么 $\hat{I}$ 与 Hamilton 算符对易,即 $\hat{H}$ 与 $\hat{I}$ 对易 $[\hat{H},\hat{I}]=0$. 这种由体系的空间反演对称性决定的守恒量称为**宇称**. $\hat{I}$ 称为**宇称算符**,它没有明显的表达式.

为了进一步明确宇称守恒的意义,现在求宇称算符 $\hat{I}$ 的本征值

$$\hat{I}\psi(\boldsymbol{r}) = \lambda\psi(\boldsymbol{r}) \tag{14.5.11}$$

再用 $\hat{I}$ 作用一次

$$\hat{I}^2\psi(\boldsymbol{r}) = \lambda\hat{I}\psi(\boldsymbol{r}) \tag{14.5.12}$$

上式左边 $\hat{I}^2\psi(\boldsymbol{r})=\hat{I}\hat{I}\psi(\boldsymbol{r})=\hat{I}\psi(-\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})$;上式右边再利用式(14.5.11)得到

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \lambda^2\psi(\boldsymbol{r}) \tag{14.5.13a}$$

故宇称算符 $\hat{I}$ 的本征值为 $\lambda=\pm1$. 相应的两个本征态为

$$\hat{I}\psi_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}) = \psi_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r});\quad \hat{I}\psi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}) = -\psi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}) \tag{14.5.13b}$$

即

$$\psi_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}) = \psi_{\mathrm{s}}(-\boldsymbol{r});\quad \psi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}) = -\psi_{\mathrm{a}}(-\boldsymbol{r}) \tag{14.5.13c}$$

上式表明:宇称算符 $\hat{I}$ 的两个本征态 ψ_{s} 和 ψ_{a} 分别是偶函数和奇函数. 由此可见,宇称的具体意义是表明波函数的奇偶性. 因此,宇称守恒的含义是:如果一个体系具有空间反演对称性,这种体系的波函数有确定的奇偶性——或为奇函数,或为偶函数,而且波函数的奇偶性不随时间变化.

可见,量子力学与经典力学一样,守恒量总是与体系的某种对称性相联系. 但

在量子力学中，由于量子态的描述与经典力学的描述不同，守恒量的含义也完全不同. 量子力学中守恒量的含义为

1. 对一个任意的量子态 ψ（不一定是定态），守恒量并没有一个确定的值，仅仅是指守恒量的平均值和测量概率分布不随时间变化；如果量子态 ψ 就是守恒量的本征态，则守恒量才有确定的值，这个值就是守恒量相对应算符的本征值.

2. 并非所有守恒量都可以同时取确定值. 例如，空间旋转不变性导致的守恒量——角动量的三个分量是不对易的. 一般，它们不能同时取确定值（$l=0$ 例外），这与空间旋转的数学结构有关，我们不进一步讨论.

习　题　14

14.1　为了保证

$$\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

是 Hermite 算符，证明波函数必须满足周期性条件.（提示：用分部积分）

14.2　在 $t=0$ 时氢原子的波函数为

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{10}}\left[2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}\right]$$

求：(1) 能量期望值 $E=\langle\psi(0)|\hat{H}|\psi(0)\rangle$；(2) 在 t 时刻体系处于 $l=1, m=1$ 态的概率；(3) t 时刻的波函数.

答案：$E=11E_1/20=-7.68\mathrm{eV}$；$P=1/5$.

14.3　设 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 是 Hermite 算符，证明算符

$$F_+ = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}) \text{ 和 } F_- = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})$$

也是 Hermite 算符.

14.4　设属于能级 E 有三个简并态 ψ_1、ψ_2 和 ψ_3，彼此线性独立，但不正交. 试利用它们构成一组正交归一的波函数.（提示：用 Schmidt 正交化方法）

14.5　宇称算符定义为：$\hat{\pi}\psi(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r})$. (1) 证明 $\hat{\pi}^\dagger=\hat{\pi}$；(2) 证明 $\hat{\pi}^2=1$；(3) 求 $\hat{\pi}$ 的本征值和本征函数.（提示：用 Hermite 算符的定义）

答案：本征值为 ±1，本征函数为偶（奇）函数.

14.6　在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的分立谱本征态中，证明 $[\hat{A},\hat{B}]$ 的平均值为零.（提示：用 Hermite 算符的定义）

14.7　用不确定关系，证明一维谐振子的最小能量为 $\hbar\omega/2$.（提示：

$$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0,\quad (\Delta x)^2=\langle x^2\rangle,\quad (\Delta p)^2=\langle p^2\rangle.$$

$E=\langle H\rangle=\langle p^2\rangle/(2m)+m\omega^2\langle x^2\rangle/2$，然后利用 $\Delta x\Delta p=\hbar/2$，求 E 的极小）

14.8　Hermite 算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 满足 $A^2=B^2=1$,$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$,$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 均无简并.求:(1) 在 $\hat{A}$ 表象中 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的矩阵表示式,以及 $\hat{B}$ 的本征矩阵;(2) 在 $\hat{B}$ 表象中 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的矩阵表示式,以及 $\hat{A}$ 的本征矩阵;(3) 求从 $\hat{A}$ 表象到 $\hat{B}$ 表象的变换矩阵.(提示:由 $A^2=B^2=1$,$\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的本征值只有两个:$\lambda_{1,2}=\pm 1$)

答案:(1) $\hat{A}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$, $\hat{B}=\begin{bmatrix}0 & e^{i\delta}\\ e^{-i\delta} & 0\end{bmatrix}$

$\hat{B}$ 的本征矩阵:$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ e^{-i\delta}\end{bmatrix}$和$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -e^{-i\delta}\end{bmatrix}$;(2) 与(1)类似;

(3) $\hat{S}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta}\end{bmatrix}$.

14.9　用不确定关系,求 He 基态的能量.(提示:He 原子的 Hamilton 为

$$H=\frac{1}{2m}(p_1^2+p_2^2)-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r_{12}}$$

$$\left\langle\frac{1}{r_1}\right\rangle=\left\langle\frac{1}{r_2}\right\rangle\approx\frac{1}{R};\quad\left\langle\frac{1}{r_{12}}\right\rangle\approx\frac{1}{2R}$$

由不确定关系:$\langle p_1^2\rangle=\langle p_2^2\rangle\approx\hbar^2/R^2$,然后求 $E=\langle H\rangle$ 的极小)

答案:$E\approx-3.06\,\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}$.

14.10　已知在 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同表象中 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵为

$$\hat{L}_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix},\quad\hat{L}_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\begin{bmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{bmatrix}$$

求它们的本征值和相应的归一化波函数.

14.11　设 $\hat{\sigma}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{bmatrix}$,证明关系 $\exp(i\lambda\hat{\sigma})=\cos\lambda+i\hat{\sigma}\sin\lambda$.(提示:用算符函数的定义)

14.12　求算符

$$\hat{T}(a)\equiv\exp\left(-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}\right),\quad\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

的本征值和本征函数,其中 a 为实数.(提示:利用$[\hat{T}(a)]^{\dagger}=[\hat{T}(a)]^{-1}$)

答案:$\lambda=\exp(-ika)$,$\psi_k(x)=u_k(x)\exp(ikx)$,其中 $u_k(x)=u_k(x-a)$为周期函数.

第15章　近似方法

由于体系的 Hamilton 算符往往比较复杂，Schrödinger 方程能够严格求解的情况很少. 因此引进各种近似方法是十分必要的. 常用的近似方法有微扰法、变分法、自洽场、半经典近似等. 不同的近似方法有不同的适用范围. 由于体系的 Hamilton 算符可以显含时间，故近似方法也可分为适用于定态和非定态两类，前者主要目的是求量子系统的能级分布，特别是基态能级；而后者的主要目的是求量子系统在含时微扰作用下，从一个能级到另一个能级的跃迁概率. 本章主要介绍几种常用的近似方法，包括定态(也称为定常)微扰理论(非简并态和简并态)、变分方法以及含时微扰理论.

15.1　非简并态微扰和电介质的极化

设体系的 Hamilton 函数不显含时间，并且可表示成 $\hat{H}=\hat{H}_0+\varepsilon\hat{H}'$. 本征值问题

$$\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \tag{15.1.1}$$

精确可解，即已经求得$\{\psi_n^{(0)},E_n^{(0)}\}$(注意：下标代表一个指标集). 我们要求解本征值问题

$$(\hat{H}_0+\varepsilon\hat{H}')\psi_n = E_n\psi_n \tag{15.1.2}$$

而上式是不能严格求解的. 当 $\varepsilon\ll 1$ 时，可用微扰法求近似解. 假定能级 $E_n^{(0)}$ 是非简并的(严格地讲，是指要用微扰论来计算它的修正的那个能级，即第 n 个能级是非简并，而对其他能级无要求)，将$\{\psi_n,E_n\}$作微扰展开

$$E_n = \sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon^k E_n^{(k)};\quad \psi_n = \sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon^k\psi_n^{(k)} \tag{15.1.3}$$

显然$\{\psi_n^{(0)},E_n^{(0)}\}$表示零级近似，$\{\psi_n^{(1)},E_n^{(1)}\}$、$\{\psi_n^{(2)},E_n^{(2)}\}$、…、$\{\psi_n^{(k)},E_n^{(k)}\}$、…表示对波函数和能级的第一次、第二次以及第 k 次修正. 上式代入方程(15.1.2)且比较 ε 的同次幂得到

$$\varepsilon^0:\hat{H}_0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \tag{15.1.4}$$

$$\varepsilon^1:[\hat{H}_0-E_n^{(0)}]\psi_n^{(1)} = -[\hat{H}'-E_n^{(1)}]\psi_n^{(0)} \tag{15.1.5}$$

$$\varepsilon^2:[\hat{H}_0-E_n^{(0)}]\psi_n^{(2)} = -[\hat{H}'-E_n^{(1)}]\psi_n^{(1)}+E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} \tag{15.1.6}$$

一级修正:零级近似方程(15.1.4)已假定可解.我们仅考虑一级修正.因 $\hat{H}_0$ 是 Hermite 算符,$\{\psi_n^{(0)}\}$ 是正交、归一的完备系,可将一级波函数修正 $\psi_n^{(1)}$ 作广义 Fourier 展开

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l^{(1)} \psi_l^{(0)} \tag{15.1.7}$$

代入方程(15.1.5)

$$\sum_{l=1}^{\infty} a_l^{(1)} [E_l^{(0)} - E_n^{(0)}] \psi_l^{(0)} = -[\hat{H}' - E_n^{(1)}] \psi_n^{(0)} \tag{15.1.8}$$

两边以 $\psi_m^{(0)}$ 取内积得到

$$a_m^{(1)} [E_m^{(0)} - E_n^{(0)}] = E_n^{(1)} \delta_{mn} - (\psi_m^{(0)}, \hat{H}' \psi_n^{(0)}) \tag{15.1.9}$$

记

$$H'_{mn} = (\psi_m^{(0)}, \hat{H}' \psi_n^{(0)}) \equiv \langle \psi_m^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \psi_n^{(0)} \rangle \tag{15.1.10}$$

取 $m=n$,式(15.1.9)给出

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} \tag{15.1.11}$$

上式即为**能级一级修正**.如果 $m \neq n$,由式(15.1.9)得到

$$a_m^{(1)} = \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{15.1.12}$$

因此在一级近似下,波函数为

$$\begin{aligned} \psi_n &\approx \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \psi_n^{(1)} = \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \sum_{l=1}^{\infty} a_l^{(1)} \psi_l^{(0)} \\ &= (1 + \varepsilon^1 a_n^{(1)}) \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \sum_{l \neq n}^{\infty} \frac{H'_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \psi_l^{(0)} \end{aligned} \tag{15.1.13a}$$

$a_n^{(1)}$ 可由波函数的归一化条件决定

$$\begin{aligned} (\psi_n, \psi_n) &\approx (\psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \psi_n^{(1)}, \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \psi_n^{(1)}) \\ &\approx (\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(0)}) + \varepsilon^1 (\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}) + \varepsilon^1 (\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(0)}) = 1 \end{aligned} \tag{15.1.13b}$$

而$(\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(0)})=1$,故

$$(\psi_n^{(0)}, \psi_n^{(1)}) + (\psi_n^{(1)}, \psi_n^{(0)}) = 0 \tag{15.1.13c}$$

即 $a_n^{(1)} + a_n^{*(1)} = 0$,因此 $a_n^{(1)} \equiv \mathrm{i}\gamma$($\gamma$ 为实数).由式(15.1.13a)

$$\begin{aligned} \psi_n &= (1 + \mathrm{i}\varepsilon^1 \gamma) \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \sum_{l \neq n}^{\infty} a_l^{(1)} \psi_l^{(0)} + O(\varepsilon^2) \\ &\approx \exp(\mathrm{i}\varepsilon^1 \gamma) \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1 \sum_{l \neq n}^{\infty} a_l^{(1)} \psi_l^{(0)} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \tag{15.1.14a}$$

作近似

$$\psi_n \approx \exp(\mathrm{i}\varepsilon^1 \gamma) \left[\psi_n^{(0)} + \exp(-\mathrm{i}\varepsilon^1 \gamma) \varepsilon^1 \sum_{l \neq n}^{\infty} a_l^{(1)} \psi_l^{(0)} + O(\varepsilon^2) \right]$$

$$\approx \exp(\mathrm{i}\varepsilon^1\gamma)\left[\psi_n^{(0)} + (1-\mathrm{i}\varepsilon^1\gamma)\varepsilon^1\sum_{l\neq n}^{\infty}a_l^{(1)}\psi_l^{(0)} + O(\varepsilon^2)\right]$$

$$\approx \exp(\mathrm{i}\varepsilon^1\gamma)\left[\psi_n^{(0)} + \varepsilon^1\sum_{l\neq n}^{\infty}a_l^{(1)}\psi_l^{(0)} + O(\varepsilon^2)\right] \tag{15.1.14b}$$

因而 $a_n^{(1)}$ 的作用仅仅为 ψ_n 增加了一个相位因子，可取为零，$a_n^{(1)}=0$. 因此能级和波函数的一级修正为

$$E_n \approx E_n^{(0)} + H'_{nn} = E_n^{(0)} + \langle n \mid \hat{H}' \mid n\rangle \tag{15.1.15}$$

$$\psi_n \approx \psi_n^{(0)} + \varepsilon^1\sum_{l\neq n}^{\infty}\frac{H'_{ln}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}\psi_l^{(0)} \tag{15.1.16}$$

方程(15.1.15)写成这样的优点是：能级修正只与量子态有关，而与具体的表象无关. 由上式可以看出，微扰成立的条件为

$$\left|\frac{H'_{ln}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}\right| \ll 1 \tag{15.1.17}$$

否则，方程(15.1.16)中级数收敛很慢. 上式不仅与 H'_{ln}，而且与能级差有关，能级越密集，收敛越慢. 如果存在非常接近的能级，即使简并态微扰方法也不适用(见下节讨论).

二级微扰：同样用零级波函数展开

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{l=1}^{\infty}a_l^{(2)}\psi_l^{(0)} \tag{15.1.18}$$

代入方程(15.1.6)得到

$$\sum_{l=1}^{\infty}a_l^{(2)}\left[E_l^{(0)}-E_n^{(0)}\right]\psi_l^{(0)} = -\sum_{l\neq n}^{\infty}a_l^{(1)}\hat{H}'\psi_l^{(0)} + H'_{nn}\sum_{l\neq n}^{\infty}a_l^{(1)}\psi_l^{(0)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} \tag{15.1.19}$$

两边以 $\psi_k^{(0)}$ 取内积得到

$$a_k^{(2)}\left[E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\right] = -\sum_{l\neq n}^{\infty}a_l^{(1)}H'_{kl} + H'_{nn}a_k^{(1)} + E_n^{(2)}\delta_{kn} \tag{15.1.20}$$

当 $k=n$ 时，注意到 $a_n^{(1)}=0$，由上式得到

$$E_n^{(2)} = \sum_{l\neq n}^{\infty}a_l^{(1)}H'_{nl} = \sum_{l\neq n}^{\infty}\frac{H'_{ln}H'_{nl}}{E_l^{(0)}-E_n^{(0)}} = \sum_{l\neq n}^{\infty}\frac{|H'_{nl}|^2}{E_l^{(0)}-E_n^{(0)}} \tag{15.1.21}$$

因此精确到二级近似，能量本征值为

$$E_n \approx E_n^{(0)} + \langle n \mid \hat{H}' \mid n\rangle + \sum_{l\neq n}^{\infty}\frac{|H'_{nl}|^2}{E_l^{(0)}-E_n^{(0)}} \tag{15.1.22}$$

例 15.1.1 电介质的极化

解： 各向同性的电介质在外电场作用下的极化. 当没有外电场时，介质中的离子在其平衡位置作小振动，可看作简谐振动. 设沿 x 方向加上均匀的外电场 ε，

它只对 x 方向的振动产生影响.假定离子带电 q,则 Hamilton 函数为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\varepsilon x=\hat{H}_0+\hat{H}' \tag{15.1.23}$$

在弱电场下,$\hat{H}'=-q\varepsilon x$ 可看作微扰.零级近似为

$$\psi_n^{(0)}=N_n\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)H_n(\alpha x);\quad E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{15.1.24}$$

其中 $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$.对一级微扰,$E_n^{(1)}=\langle n|\hat{H}'|n\rangle$,波函数的平方是偶函数,而 $\hat{H}'=-q\varepsilon x$ 是奇函数,故积分为零,必须考虑二级微扰,通过复杂的计算可以得到

$$E_n^{(2)}=\sum_{l\neq n}^{\infty}\frac{|H'_{nl}|^2}{E_l^{(0)}-E_n^{(0)}}=-\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \tag{15.1.25}$$

事实上,Schrödinger 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\varepsilon x\right)\psi=E\psi \tag{15.1.26}$$

通过坐标变换可严格求解,上式可变成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(x-\frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2-\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\right]\psi=E\psi \tag{15.1.27}$$

令 $x'=x-q\varepsilon/(m\omega^2)$,上式是平衡位置作了一个位移的简谐振动

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x'^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x'^2\right)\psi=\left(E+\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\right)\psi \tag{15.1.28}$$

故严格的能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2} \tag{15.1.29}$$

可见二级微扰实际上给出了严格的能量本征值,但精确的波函数为

$$\psi_n=N_n\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x'^2\right)H_n(\alpha x') \tag{15.1.30}$$

在电场作用下,正离子向电场方向移动,而负离子向电场反方向移动,从而产生电偶极矩

$$p=2q\Delta l=2\frac{q^2\varepsilon}{m\omega^2} \tag{15.1.31}$$

故电极化率为$\chi=2q^2/(m\omega^2)$.

15.2 简并态微扰和能级的强耦合

考虑未微扰能级 $E_n^{(0)}$ 是 f 度简并的,即对应能级 $E_n^{(0)}$ 有 f 个零级本征函数 $\psi_{n\mu}^{(0)}$($\mu=1,2,\cdots,f$)(假定已正交和归一化).对简并态的微扰,第一个问题是微扰展开式(15.1.3)中的零级波函数 $\psi_n^{(0)}$ 取 $\psi_{n\mu}^{(0)}$($\mu=1,2,\cdots,f$)中的哪一个呢? 仍作

微扰展开

$$E_n = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k E_n^{(k)}; \quad \psi_n = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \psi_n^{(k)} \tag{15.2.1}$$

代入方程(15.1.2)且比较 ε 的同次幂得到

$$\varepsilon^0 : \hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)} \tag{15.2.2}$$

$$\varepsilon^1 : [\hat{H}_0 - E_n^{(0)}]\psi_n^{(1)} = -[\hat{H}' - E_n^{(1)}]\psi_n^{(0)} \tag{15.2.3}$$

现在 $\psi_{n\mu}^{(0)}(\mu=1,2,\cdots,f)$都满足零级方程(15.2.2),故作线性叠加

$$\psi_n^{(0)} = \sum_{\nu=1}^{f} C_\nu \psi_{n\nu}^{(0)} \tag{15.2.4}$$

作为零级近似波函数. 另一方面,对一级近似仍作广义 Fourier 展开

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{l=1}^{\infty} b_l^{(1)} \psi_l^{(0)} \tag{15.2.5}$$

上二式代入方程(15.2.3)得到一级近似的方程

$$\varepsilon^1 : \sum_{l=1}^{\infty} b_l^{(1)} [E_l^{(0)} - E_n^{(0)}]\psi_l^{(0)} = -\sum_{\nu=1}^{f} C_\nu [\hat{H}' - E_n^{(1)}]\psi_{n\nu}^{(0)} \tag{15.2.6}$$

两边用 $\psi_{n\sigma}^{(0)}(\sigma=1,2,\cdots,f)$取内积得到

$$\sum_{l=1}^{\infty} b_l^{(1)} [E_l^{(0)} - E_n^{(0)}](\psi_{n\sigma}^{(0)}, \psi_l^{(0)}) = -\sum_{\tau=1}^{f} C_\tau [\langle \psi_{n\sigma}^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \psi_{n\tau}^{(0)} \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\sigma\tau}]$$

当 $n \neq l$:$\psi_{n\sigma}^{(0)}$ 与 $\psi_l^{(0)}$ 正交:$(\psi_{n\sigma}^{(0)}, \psi_l^{(0)})=0$;当 $n=l$:$E_l^{(0)}=E_n^{(0)}$,故上式左边恒等于零,即

$$\sum_{\tau=1}^{f} C_\tau [\langle \psi_{n\sigma}^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \psi_{n\tau}^{(0)} \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\sigma\tau}] = 0, \quad (\sigma = 1,2,\cdots,f) \tag{15.2.7}$$

上式是线性齐次方程组,存在非零解的条件为系数行列式等于零,即

$$\det [\langle \psi_{n\sigma}^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \psi_{n\tau}^{(0)} \rangle - E_n^{(1)} \delta_{\sigma\tau}] = 0 \tag{15.2.8}$$

称为**久期方程**. 由上式可求得 f 个根 $E_{n\sigma}^{(1)}(\sigma=1,2,\cdots,f)$,由此从方程(15.2.7)可求得 f 套$\{C_\tau\}$(每套有一个任意常数,由波函数的归一化条件决定). 如果 f 个根 $E_{n\sigma}^{(1)}$ 全是单根,则由于微扰导致简并消除;如果有重根,简并部分消除.

如果零级波函数 $\psi_{n\sigma}^{(0)}(\sigma=1,2,\cdots,f)$不仅是 $\hat{H}_0$ 的本征函数,而且能使 $\hat{H}'$也对角化,即

$$\langle \psi_{n\sigma}^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \psi_{n\tau}^{(0)} \rangle = H'_{n\tau} \delta_{\sigma\tau} \tag{15.2.9}$$

那么由方程(15.2.8)很容易得到 $E_n^{(1)} = H'_{n\sigma}$. 因此零级波函数的选择是非常重要的,能使问题的计算大大简化.

下面考虑一种特殊的情况:$\hat{H}_0$ 存在 g 个能级 $E_k^{(0)}(k=1,2,\cdots,g)$,它们非常接近但不简并,相应的本征函数为$\{\psi_k^{(0)}\}(k=1,2,\cdots,g)$. 而 $\hat{H}_0$ 的其他能级远离这

些能级. 显然非简并态微扰公式(15.1.22)是不适合的,因为能级太接近,级数收敛慢;而用简并态微扰也不能给出令人满意的结果,因 $E_k^{(0)}$ 并不简并. 事实上,微扰有可能使这几个邻近的量子态强烈混合,故一般的微扰方法不适用. 此时,更好的做法是:在$\{\psi_k^{(0)}\}(k=1,2,\cdots,g)$所张的子空间内,同时计算 g 个能级的微扰,而不是像式(15.1.22)和(15.2.8)那样单独计算第 n 个能级的微扰.

显然,在$\{\psi_k^{(0)}\}(k=1,2,\cdots,g)$所张的子空间内,$\hat{H}_0$ 在自身表象中为对角矩阵

$$\boldsymbol{H}_0=\begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & E_g^{(0)} \end{bmatrix} \tag{15.2.10}$$

而对应于 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$的矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的元素为

$$\begin{aligned} H_{mk} &= (\psi_m^{(0)},\hat{H}\psi_k^{(0)}) = [\psi_m^{(0)},(\hat{H}_0+\hat{H}')\psi_k^{(0)}] \\ &= E_m^{(0)}\delta_{mk}+\langle\psi_m^{(0)} \mid \hat{H}' \mid \psi_k^{(0)}\rangle \\ &= E_m^{(0)}\delta_{mk}+\langle m \mid \hat{H}' \mid k\rangle = E_m^{(0)}\delta_{mk}+H'_{mk} \end{aligned} \tag{15.2.11}$$

即

$$\boldsymbol{H}=\begin{bmatrix} (E_1^{(0)}+H'_{11}) & H'_{12} & \cdots & H'_{1g} \\ H'_{21} & (E_2^{(0)}+H'_{22}) & \cdots & H'_{2g} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H'_{g1} & H'_{g2} & \cdots & E_g^{(0)}+H'_{gg} \end{bmatrix} \tag{15.2.12}$$

设 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$的近似本征函数为(注意:存在 $\hat{H}'$后,$\{\psi_k^{(0)}\}$所张子空间不一定完备,故是一种近似)

$$\psi=\sum_{k=1}^{g}C_k\psi_k^{(0)} \rightarrow \psi=[C_1,C_2,\cdots,C_g]^{\mathrm{T}} \tag{15.2.13}$$

则定态 Schrödinger 方程 $\hat{H}\psi=E\psi$ 变为

$$\begin{bmatrix} E-(E_1^{(0)}+H'_{11}) & -H'_{12} & \cdots & -H'_{1g} \\ -H'_{21} & E-(E_2^{(0)}+H'_{22}) & \cdots & -H'_{2g} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -H'_{g1} & -H'_{g2} & \cdots & E-(E_g^{(0)}+H'_{gg}) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_g \end{bmatrix}=0$$

上式存在非零解的条件为系数矩阵的行列式等于零,即

$$\det[(E-E_m^{(0)})\delta_{mk}-H'_{mk}]=0 \tag{15.2.14}$$

于是可得到 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$的 g 个能量本征值.

例 15.2.1　二能级系统.

解：　设 $\hat{H}_0$ 存在两个很接近的能级，其他能级远离这两个能级. 则

$$\begin{bmatrix} E-(E_1^{(0)}+H'_{11}) & -H'_{12} \\ -H'_{21} & E-(E_2^{(0)}+H'_{22}) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}=0 \tag{15.2.15}$$

和

$$\det\begin{bmatrix} E-\bar{E}_1^{(0)} & -H'_{12} \\ -H'_{21} & E-\bar{E}_2^{(0)} \end{bmatrix}=0 \tag{15.2.16}$$

其中 $\bar{E}_1^{(0)}\equiv E_1^{(0)}+H'_{11}$，$\bar{E}_2^{(0)}\equiv E_2^{(0)}+H'_{22}$. 从上式得到两个解为

$$E_{\pm}=E_c\pm\sqrt{d^2+|H'_{12}|^2}=E_c\pm|H'_{12}|\sqrt{1+R^2} \tag{15.2.17}$$

其中已令

$$E_c=\frac{1}{2}(\bar{E}_2^{(0)}+\bar{E}_1^{(0)})；\quad d=\frac{1}{2}(\bar{E}_2^{(0)}-\bar{E}_1^{(0)})；\quad R=\frac{d}{|H'_{12}|} \tag{15.2.18}$$

显然参数 R 表征两个能级在微扰作用下的耦合强度. 当 $R\gg1$，$E_{\pm}\approx\bar{E}_{2,1}^{0}$，称为弱耦合；$R\ll1$，$E_{\pm}=E_c\pm|H'_{12}|$，称为强耦合.

15.3　变分方法和 Hartree 自洽场方法

变分近似的基本思想是：寻找一泛函，使这个泛函的变分问题（即求泛函的极值问题）与定态 Schrödinger 方程等价. 于是求解定态 Schrödinger 方程变成泛函的变分问题. 设定态 Schrödinger 方程为

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{15.3.1}$$

另一方面，考虑泛函

$$E(\psi)=\frac{(\psi,\hat{H}\psi)}{(\psi,\psi)} \tag{15.3.2}$$

对任意的量子态 ψ，E 依赖于 ψ，不同的 ψ，给出不同的 E. 故 $E(\psi)$ 定义了一个泛函.

可以证明：泛函 $E(\psi)$ 的极值条件是 $\hat{H}\psi=E\psi$，即满足定态 Schrödinger 方程；反过来，如果 ψ 满足定态 Schrödinger 方程，那么 $E(\psi)$ 一定取极值，即一阶变分为零 $\delta E(\psi)=0$.

证明：令 $A=(\psi,\hat{H}\psi)$ 和 $B=(\psi,\psi)$，由式(15.3.2)，$E(\psi)$ 的一阶变分为

$$\delta E(\psi)=\frac{\delta A}{B}-\frac{A\delta B}{B^2}=\frac{1}{B}\left(\delta A-\frac{A\delta B}{B}\right)=\frac{1}{B}(\delta A-E\delta B) \tag{15.3.3}$$

而 $\delta A=(\delta\psi,\hat{H}\psi)+(\psi,\hat{H}\delta\psi)$ 和 $\delta B=(\delta\psi,\psi)+(\psi,\delta\psi)$，代入上式得

$$\delta E(\psi)=\frac{1}{B}(\delta A-E\delta B)$$

$$= \frac{1}{B}\{[(\delta\psi, \hat{H}\psi) + (\psi, \hat{H}\delta\psi)] - E[(\delta\psi, \psi) + (\psi, \delta\psi)]\} \quad (15.3.4)$$

而 $\hat{H}$ 是 Hermite 算符,即$(\psi, \hat{H}\delta\psi) = (\hat{H}\psi, \delta\psi)$,$E$ 为实数,上式变为

$$\begin{aligned}\delta E(\psi) &= \frac{1}{B}\{[(\hat{H}\psi, \delta\psi)^* + (\hat{H}\psi, \delta\psi)] - E[(\psi, \delta\psi)^* + (\psi, \delta\psi)]\} \\ &= \frac{2}{B}\mathrm{Re}[(\hat{H}\psi, \delta\psi) - (E\psi, \delta\psi)] \\ &= \frac{2}{B}\mathrm{Re}[(\hat{H}\psi - E\psi, \delta\psi)] \end{aligned} \quad (15.3.5)$$

由于 $\delta\psi$ 是独立变分,由 $\delta E(\psi)=0$ 得到极值条件为 $\hat{H}\psi = E\psi$;反之,如果 ψ 满足 $\delta E(\psi)=0$,但不满足方程(15.3.1),即 $\hat{H}\psi - E\psi = \varphi \neq 0$,取 $\delta\psi = \varepsilon\varphi$(其中 $\varepsilon > 0$ 足够小,使 $\varepsilon\varphi$ 是 ψ 的邻域),由上式得

$$\delta E(\psi) = \frac{2}{B}\mathrm{Re}\,[(\hat{H}\psi - E\psi, \delta\psi)] = \frac{2\varepsilon}{B}\mathrm{Re}\,[(\varphi, \varphi)] = 0 \quad (15.3.6)$$

由内积的定义,必定 $\varphi \equiv 0$(几乎处处). 故 $\hat{H}\psi = E\psi$.

这就证明了 $\delta E(\lambda)=0$ 与定态 Schrödinger 方程 $\hat{H}\psi = E\psi$ 是等价的,称为**变分原理**. 因此求解定态 Schrödinger 方程变成求 $E(\psi)$ 的变分问题. 而方程(15.3.2)的变分可由其他方法近似求得,这就相当于求得了 Schrödinger 方程的近似解. 注意,泛函 $E(\psi)$ 的极值问题与下列条件极值问题是等价的:在归一化条件下,求泛函$\langle H \rangle = (\psi, \hat{H}\psi)$的极值. 事实上,根据 Lagrange 乘子法,可以构成新的泛函

$$W = \langle H \rangle - \eta[(\psi, \psi) - 1] \quad (15.3.7)$$

其中 η 为 Lagrange 乘子,新泛函的极值条件为 $\delta W = 0$,即

$$\delta W = \delta\langle H \rangle - \eta\,[(\delta\psi, \psi) + (\psi, \delta\psi)] = 0 \quad (15.3.8)$$

上式即为

$$\begin{aligned}\delta W &= (\delta\psi, \hat{H}\psi) + (\psi, \hat{H}\delta\psi) - \eta[(\delta\psi, \psi) + (\psi, \delta\psi)] \\ &= (\hat{H}\psi, \delta\psi)^* + (\hat{H}\psi, \delta\psi) - \eta[(\psi, \delta\psi)^* + (\psi, \delta\psi)] \\ &= 2\mathrm{Re}[(\hat{H}\psi - \eta\psi, \delta\psi)] = 0 \end{aligned} \quad (15.3.9)$$

与方程(15.3.5)类似,可见 Lagrange 乘子 η 即为能量本征值. 另外,显然$\langle H \rangle = (\psi, \hat{H}\psi)$是 Hamilton 函数在量子态 ψ 中的平均值,也是系统能量的平均值. 故求泛函$\langle H \rangle = (\psi, \hat{H}\psi)$的极值相当于求系统平均能量的极值. 物理上要求这个极值为极小值,只有当能量极小时,系统才处于稳定的平衡态.

基态能量:如果只需求能量本征值,特别是基态能量(最小本征值),变分法是一种非常有效的方法.一般步骤为:根据具体的物理问题,选择包含有参数 λ(可以是一组参数)的适当试探函数 $\psi(\lambda)$,代入方程(15.3.2),求得 $E(\lambda)$,然后求 $E(\lambda)$的极小值.这个极小值就可以认为是系统基态的能量.可以证明,由此方法求得的能量不小于基态的能量.事实上,设 $\hat{H}$ 存在正交、归一和完备的本征函数集$\{\psi_n\}$,相应的能量本征值为$\{E_n\}$.对任意的量子态 ψ 存在广义 Fourier 展开

$$\psi=\sum_n a_n\psi_n \tag{15.3.10}$$

代入式(15.3.2)得到

$$E(\psi)=\frac{(\psi,\hat{H}\psi)}{(\psi,\psi)}=\frac{\sum\limits_{nl}E_na_na_l^*(\psi_l,\psi_n)}{\sum\limits_n|a_n|^2}=\frac{\sum\limits_{nl}E_na_na_l^*\delta_{nl}}{\sum\limits_n|a_n|^2}$$

$$=\frac{\sum\limits_n E_n|a_n|^2}{\sum\limits_n|a_n|^2}\geqslant E_0\frac{\sum\limits_n|a_n|^2}{\sum\limits_n|a_n|^2}=E_0 \tag{15.3.11}$$

即由方程(15.3.2)得到的能量是基态能量的上限.变分法的优点是容易求得系统基态能量的上限,缺点是不能给出误差的估计.选取不同的试探函数 $\psi(\lambda)$可以得到不同的基态能量估计,算出的基态能量越小,越接近真正的基态能量.另外,如果用变分法求其他能级,需用逐次正交法,这里不进一步介绍.

求式(15.3.2)的变分,最常用的近似方法是 Ritz 法.设选择试探函数为 $\psi(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$,试探函数依赖于一组参数$(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$.代入式(15.3.2)得到 $E=E(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$,变化参数$(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$,使 $E(\lambda)$取极值,即

$$\frac{\partial E(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)}{\partial\lambda_i}=0\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{15.3.12}$$

然后求出 $E=E(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$的极小值.下面以具体例子来说明.

例 15.3.1　He 原子的基态能量.

解:　He 原子的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_1|}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_2|}+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

上式假定原子核不动且位于坐标原点,$\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 分别是两个电子的位置矢量.最后一项表示两个电子的相互作用.如果没有最后一项,上式为两个类氢原子的 Hamilton 算符相加,基态波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2)=\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\exp\left[-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)\right] \tag{15.3.13}$$

注意:上式没有考虑全同粒子波函数的对称性(见第 17 章讨论).如果是严格的类氢原子 $Z=2$.但电子-电子存在相互作用,近似地,这种相互作用可看成:一个电子

在另一个电子的“电子云”中运动，“电子云”对核-电子之间的库仑相互作用起到屏蔽作用，屏蔽的效果相当于使 $Z<2$. 因此我们选择式(15.3.13)作为试探函数，Z 为变分参数. 因试探函数本身就是归一化的，即

$$(\psi,\psi)=\frac{Z^6}{\pi^2 a_0^6}\int_0^\infty\int_0^\infty \exp\left[-\frac{2Z}{a_0}(r_1+r_2)\right](4\pi r_1^2)\mathrm{d}r_1(4\pi r_2^2)\mathrm{d}r_2=1 \tag{15.3.14}$$

于是

$$\begin{aligned}E(Z)&=\iint \psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\iint\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\mathrm{e}^{-Z(r_1+r_2)/a_0}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)\mathrm{e}^{-Z(r_1+r_2)/a_0}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&\quad+\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\iint\left[-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)\mathrm{e}^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&\quad+\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^2\iint\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\,|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\mathrm{e}^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=I_1+I_2+I_3\end{aligned}$$

上式中三个积分：前两个容易通过分部积分求得，而第三个积分比较复杂，通过复杂的运算得到(见习题 17.10)

$$I_1=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{e^2Z^2}{a_0}\right);\quad I_2=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{4e^2Z}{a_0}\right);\quad I_3=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{5e^2Z}{8a_0}\right)$$

所以

$$E(Z)=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\left(Z^2-4Z+\frac{5}{8}Z\right) \tag{15.3.15}$$

由极小值条件得到

$$\left.\frac{\delta E(Z)}{\delta Z}\right|_{Z_0}=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\left.\left(2Z-4+\frac{5}{8}\right)\right|_{Z_0}=0 \tag{15.3.16}$$

故 $Z_0=27/16=1.69$，代入式(15.3.15)得到 He 原子基态的能量为

$$E_0\approx E(Z_0)=-2.85\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\right) \tag{15.3.17}$$

实验值为 -2.904(指(15.3.17)式前面的系数). 可见用变分法给出的基态能量与实验结果符合得相当好. 当然，这与我们选择的试探函数式(15.3.13)和变分参数 Z 较好有直接的关系，因式(15.3.13)和参数 Z 的物理意义明显.

Hartree 自洽场方法：我们知道精确求解 Schrödinger 方程往往是不可能的. 根据物理条件，如果对波函数的形式作一定的限制，由变分法可得到近似的能量本征方程，而这个方程比原来的 Schrödinger 方程要简单得多. 下面以多电子原子的 Hartree 自洽场方法为例来说明该方法.

多电子(设 N 个电子)系统严格来说不存在单粒子态，因为电子-电子之间的

Coulomb 相互作用,使整个系统的 Schrödinger 方程不可能分离变量而化成单个电子的方程.但在一定的近似下,单粒子概念仍然适用.在原子中,可以近似地用一个平均场来代替某个电子受到原子核及其他电子的作用,于是可以写出单个电子的 Schrödinger 方程.设第一个电子处于量子态 $\psi_1(\boldsymbol{r}_1)$、第二个电子处于量子态 $\psi_2(\boldsymbol{r}_2)$,…,第 N 个电子处于量子态 $\psi_N(\boldsymbol{r}_N)$.整个系统的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\psi_1(\boldsymbol{r}_1)\psi_2(\boldsymbol{r}_2)\cdots\psi_N(\boldsymbol{r}_N) \tag{15.3.18}$$

注意:上式没有考虑电子的全同性(见第 17 章讨论).系统的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\hat{H}_0^{(i)}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N}U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|) \tag{15.3.19}$$

其中 $\hat{H}_0^{(i)}$ 和 $U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)$ 分别为单个电子的 Hamilton 算符与电子-电子之间的相互作用势

$$\hat{H}_0^{(i)}=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_i^2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_i|};\quad U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|} \tag{15.3.20}$$

在波函数具有形式(15.3.18)的条件下,系统的平均能量为

$$\begin{aligned}\langle H\rangle=&\sum_{i=1}^{N}\int\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\hat{H}_0^{(i)}\psi_i(\boldsymbol{r}_i)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\\&+\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N}\iint|\psi_i(\boldsymbol{r}_i)|^2U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\end{aligned} \tag{15.3.21}$$

归一条件为

$$\int|\psi_i(\boldsymbol{r}_i)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i=1\quad(i=1,2,\cdots N) \tag{15.3.22}$$

与式(15.3.7)类似,构成新泛函

$$W=\langle H\rangle-\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i\left[\int|\psi_i(\boldsymbol{r}_i)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i-1\right] \tag{15.3.23}$$

变分原理为 $\delta W=0$,而

$$\begin{aligned}\delta\langle H\rangle=&\sum_{i=1}^{N}\int[\delta\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\hat{H}_0^{(i)}\psi_i(\boldsymbol{r}_i)+\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\hat{H}_0^{(i)}\delta\psi_i(\boldsymbol{r}_i)]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\\&+\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N}\iint[\delta\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\psi_i(\boldsymbol{r}_i)+\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\delta\psi_i(\boldsymbol{r}_i)]U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\\&+\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N}\iint|\psi_i(\boldsymbol{r}_i)|^2U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)[\delta\psi_k^*(\boldsymbol{r}_k)\psi(\boldsymbol{r}_k)+\psi_k^*(\boldsymbol{r}_k)\delta\psi_k(\boldsymbol{r}_k)]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\end{aligned}$$

上式中第一行利用 $\hat{H}_0^{(i)}$ 的 Hermite 性质,第二、三项交换求和指标,可以得到

$$\delta\langle H\rangle=\mathrm{Re}\Big[\sum_{i=1}^{N}\int\delta\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\hat{H}_0^{(i)}\psi_i(\boldsymbol{r}_i)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i$$

$$+\sum_{i\neq k}^{N}\iint\delta\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\psi(\boldsymbol{r}_i)U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\Big]$$

$$=\mathrm{Re}\sum_{i=1}^{N}\int\Big[\hat{H}_0^{(i)}+\sum_{k\neq i}^{N}\int U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\Big]\psi_i(\boldsymbol{r}_i)\delta\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i$$

代入 $\delta W=0$ 并且由 $\delta\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)$的任意性得到

$$\Big[\hat{H}_0^{(i)}+\sum_{k\neq i}^{N}\int U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\Big]\psi_i(\boldsymbol{r}_i)=\varepsilon_i\psi_i(\boldsymbol{r}_i) \tag{15.3.24}$$

其中 $i=1,2,\cdots,N$. 上式即为单粒子态的能量本征方程,称为**Hartree 方程**,它比原来的 Schrödinger 方程 $\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=E\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$要简单多了. 但 Hartree 方程是非线性微分-积分方程,仍然难以严格求解. 一般采用逐步近似,即首先假定一个适当的势函数 $U^{(0)}(\boldsymbol{r}_i)$来代替

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\,|\boldsymbol{r}_i|}+\sum_{k\neq i}^{N}\int U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k \tag{15.3.25}$$

然后由 Hartree 方程求出单电子波函数 $\psi_i^{(0)}(\boldsymbol{r}_i)$,代入上式得到势函数 $U^{(1)}(\boldsymbol{r}_i)$;由 $U^{(1)}(\boldsymbol{r}_i)$再求得单电子波函数 $\psi_i^{(1)}(\boldsymbol{r}_i)$,代入上式得到势函数 $U^{(2)}(\boldsymbol{r}_i)$;重复这一过程,直到$|U^{(n+1)}(\boldsymbol{r}_i)-U^{(n)}(\boldsymbol{r}_i)|<\delta$ 为止. 最后得到的平均场称为**自洽场**. 特别要指出的是:这里的所谓单粒子态不是严格意义上的单粒子态,单粒子能级也不是严格意义上的单粒子能级. 因为第 i 个粒子的平均场与第 k 个粒子的波函数有关,因此第 i 个粒子的态或者能级实际上也与第 k 个粒子的态或者能级相关. 这种粒子称为**准粒子**. 注意:系统的总能量不是 ε_i 简单求和,因为严格来说 ε_i 是作为 Lagrange 乘子引进的. 系统能量应该由 $\langle H\rangle=\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$ 给出. 结合方程(15.3.21)和(15.3.24)得到

$$E=\langle H\rangle=\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i-\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}^{N}\iint|\psi_i(\boldsymbol{r}_i)|^2U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k$$

15.4 含时微扰:量子跃迁、光的吸收和激发

设体系的 Hamilton 函数可表示成 $\hat{H}=\hat{H}_0+\varepsilon\hat{H}'(t)$,其中 $\hat{H}_0$ 不显含时间且本征值问题

$$\hat{H}_0\psi_n(\boldsymbol{r})=\varepsilon_n\psi_n(\boldsymbol{r}) \tag{15.4.1}$$

精确可解,即已经求得$\{\psi_n,\varepsilon_n\}$. $\hat{H}_0$ 的定态波函数为

$$\Psi_n(\boldsymbol{r},t)=\psi_n(\boldsymbol{r})\exp\Big(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_n t\Big) \tag{15.4.2}$$

我们要解含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=[\hat{H}_0+\varepsilon\hat{H}'(t)]\psi \tag{15.4.3}$$

显然任意量子态 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 可以用 $\{\Psi_n(\boldsymbol{r},t)\}$ 展开成广义 Fourier 级数，即

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n(t)\Psi_n(\boldsymbol{r},t)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n(t)\psi_n(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_n t\right) \tag{15.4.4}$$

代入 Schrödinger 方程(15.4.3)得到

$$\mathrm{i}\hbar\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{\mathrm{d}a_n(t)}{\mathrm{d}t}\Psi_n+a_n(t)\frac{\partial\Psi_n}{\partial t}\right]=\sum_{n=1}^{\infty}a_n(t)[\hat{H}_0+\varepsilon\hat{H}'(t)]\Psi_n \tag{15.4.5}$$

两边以 Ψ_m 取内积得到

$$\mathrm{i}\hbar\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{\mathrm{d}a_n(t)}{\mathrm{d}t}\delta_{nm}+a_n(t)\frac{\varepsilon_n}{\mathrm{i}\hbar}\delta_{nm}\right]=\sum_{n=1}^{\infty}a_n(t)\left[\varepsilon_n\delta_{nm}+\varepsilon(\Psi_m,\hat{H}'\Psi_n)\right] \tag{15.4.6}$$

其中已利用关系

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_n}{\partial t}=\hat{H}_0\Psi_n;\quad(\Psi_m,\Psi_n)=\delta_{mn} \tag{15.4.7}$$

由式(15.4.6)得到

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m(t)}{\mathrm{d}t}&=\sum_{n=1}^{\infty}a_n(t)(\Psi_m,\varepsilon\hat{H}'\Psi_n)\\&=\sum_{n=1}^{\infty}a_n(t)\varepsilon H'_{mn}\exp(\mathrm{i}\omega_{mn}t)\end{aligned} \tag{15.4.8}$$

式中 $H'_{mn}=(\psi_m,\hat{H}'\psi_n)$；$\hbar\omega_{mn}=\varepsilon_m-\varepsilon_n$. 上式即为 $\hat{H}_0$ 表象中的 Schrödinger 方程，是严格的. 对一般的 H'_{mn}，精确求解是不可能的. 当 $\varepsilon\ll 1$ 时，引进微扰解

$$a_m(t)=\sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon^k a_m^{(k)}(t) \tag{15.4.9}$$

代入方程(15.3.8)得到

$$\mathrm{i}\hbar\sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon^k\frac{\mathrm{d}a_m^{(k)}(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}\varepsilon^k a_n^{(k)}(t)\varepsilon H'_{mn}\exp(\mathrm{i}\omega_{mn}t) \tag{15.4.10}$$

比较 ε 的同次幂得到

$$\begin{aligned}&\varepsilon^0:\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m^{(0)}(t)}{\mathrm{d}t}=0;\\&\varepsilon^1:\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m^{(1)}(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_{n=1}^{\infty}a_n^{(0)}(t)H'_{mn}\exp(\mathrm{i}\omega_{mn}t);\\&\varepsilon^2:\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m^{(2)}(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_{n=1}^{\infty}a_n^{(1)}(t)H'_{mn}\exp(\mathrm{i}\omega_{mn}t);\\&\cdots\cdots\end{aligned} \tag{15.4.11}$$

由第一式得零级近似的解为：$a_m^{(0)}(t)=c_m$（c_m 为常数），其意义为：如果忽略微扰 $\hat{H}'(t)$ 的作用，系统处于定态. 下面假定 $t=0$ 时系统处于第 l 个本征态，即 $a_m^{(0)}(t)=\delta_{ml}$；由上式中第二式得一级近似的解为

$$i\hbar\,\frac{\mathrm{d}a_m^{(1)}(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_{n=1}^{\infty}\delta_{nl}H'_{mn}\exp(\mathrm{i}\omega_{mn}t)=H'_{ml}\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t) \qquad (15.4.12)$$

于是

$$a_m^{(1)}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t H'_{ml}(t')\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')\mathrm{d}t' \qquad (15.4.13)$$

由于假定 $t=0$ 时系统处于第 l 个本征态，故 $|a_m^{(1)}(t)|^2$ 表示 t 时刻系统处于第 m 个本征态的概率，称为**跃迁概率**，记为 $W_{l\to m}$

$$W_{l\to m}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{ml}(t')\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')\mathrm{d}t'\right|^2 \qquad (15.4.14)$$

单位时间的跃迁概率称为**跃迁速率**

$$w_{l\to m}=\frac{\mathrm{d}W_{l\to m}}{\mathrm{d}t} \qquad (15.4.15)$$

例 15.4.1　含时微扰与定常微扰的关系.

解： 定常微扰可看作特殊的含时微扰：假定微扰具有如图 15.4.1 的形式，当时间足够长时，$\hat{H}'(t)$ 趋向常数 $\hat{H}'$，即为定常微扰. 此时含时微扰应该退化成定常微扰. 事实上，当 $\hat{H}'(t)$ 具有图 15.4.1 的形式时，式(15.4.12)的解为

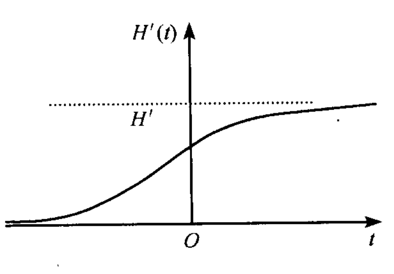


图 15.4.1　慢变微扰的形式

$$\begin{aligned}a_m^{(1)}(t)&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^t H'_{ml}(t')\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')\mathrm{d}t'\\&=-\frac{H'_{ml}(t')\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')}{\hbar\omega_{ml}}\bigg|_{-\infty}^{t}+\int_{-\infty}^t\frac{\partial H'_{ml}(t')}{\partial t'}\,\frac{\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')}{\hbar\omega_{ml}}\mathrm{d}t'\\&=-\frac{H'_{ml}(t)\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t)}{\hbar\omega_{ml}}+\int_{-\infty}^t\frac{\partial H'_{ml}(t')}{\partial t'}\,\frac{\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')}{\hbar\omega_{ml}}\mathrm{d}t'\end{aligned} \qquad (15.4.16a)$$

由上式和式(15.4.4)，一阶微扰近似下，系统的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r},t)=&\sum_{m=1}^{\infty}a_m(t)\psi_m(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_m t\right)\\=&\psi_l(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_l t\right)+\sum_{m\neq l}^{\infty}\frac{H'_{ml}(t)\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t)}{(\varepsilon_l-\varepsilon_m)}\psi_m(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_m t\right)\\&+\sum_{m\neq l}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^t\frac{\partial H'_{ml}(t')}{\partial t'}\,\frac{\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')}{\hbar\omega_{ml}}\mathrm{d}t'\right]\psi_m(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_m t\right)\\=&\left[\psi_l(\boldsymbol{r})+\sum_{m\neq l}^{\infty}\frac{H'_{ml}(t)}{(\varepsilon_l-\varepsilon_m)}\psi_m(\boldsymbol{r})\right]\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_l t\right)\end{aligned}$$

$$+\sum_{m\neq l}^{\infty}\int_{-\infty}^{t}\frac{\partial H'_{ml}(t')}{\partial t'}\frac{\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t')}{\hbar\omega_{ml}}\mathrm{d}t'\psi_m(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_m t\right)$$

因微扰对时间的变化足够慢，故 $\partial H'_{ml}/\partial t'\approx 0$，又 $\hat{H}'(t)$ 趋向常数 $\hat{H}'(t)\to\hat{H}'$，上式简化为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)\approx\left[\psi_l(\boldsymbol{r})+\sum_{m\neq l}^{\infty}\frac{H'_{ml}}{(\varepsilon_l-\varepsilon_m)}\psi_m(\boldsymbol{r})\right]\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varepsilon_l t\right)\quad(15.4.16\text{b})$$

与式(15.1.16)比较，上式显然就是定态一阶微扰修改的公式.

下面考虑几种特殊情况.

1. 常微扰的跃迁概率：假定微扰 $\hat{H}'(t)$ 在时间区 $(0,t)$ 是常数，则由(15.4.14)

$$W_{l\to m}=\frac{4}{\hbar^2}\mid H'_{ml}\mid^2\frac{\sin^2(\omega_{ml}t/2)}{\omega_{ml}^2}\qquad(15.4.17)$$

利用关系

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2 xt}{t\pi x^2}=\delta(x)\qquad(15.4.18)$$

当 $t\to\infty$ 时，方程(15.4.17)变成

$$W_{l\to m}=\frac{4}{\hbar^2}\mid H'_{ml}\mid^2\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(\omega_{ml}t/2)}{\omega_{ml}^2}=\frac{2\pi t}{\hbar^2}\mid H'_{ml}\mid^2\delta(\omega_{ml})\qquad(15.4.19\text{a})$$

跃迁速率为

$$w_{l\to m}=\frac{2\pi}{\hbar}\mid H'_{ml}\mid^2\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_l)\qquad(15.4.19\text{b})$$

上式表明：只有初态与终态的能量相等，跃迁速率才不为零，符合能量守恒定律. 注意：同一能级并不意味着是同一个量子态，因能级可能简并.

2. 周期性微扰的跃迁概率：假定微扰 $\hat{H}'(t)$ 有形式

$$\hat{H}'(t)=2\hat{F}'\cos\omega t\qquad(15.4.20)$$

其中 $\hat{F}'$ 与时间无关. 由式(15.4.14)

$$a_m^{(1)}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t H'_{ml}\exp(\mathrm{i}\omega_{ml}t)\mathrm{d}t=\frac{F'_{ml}}{\hbar}(B_+ + B_-)\qquad(15.4.21)$$

其中 $F'_{ml}=(\psi_m,\hat{F}'\psi_l)$ 以及

$$B_+=\frac{1-\exp[\mathrm{i}(\omega_{ml}+\omega)t]}{\omega_{ml}+\omega}=-\mathrm{i}\exp\left[\mathrm{i}\frac{(\omega_{ml}+\omega)}{2}t\right]\frac{\sin[(\omega_{ml}+\omega)t/2]}{(\omega_{ml}+\omega)/2}$$

$$B_-=\frac{1-\exp[\mathrm{i}(\omega_{ml}-\omega)t]}{\omega_{ml}-\omega}=-\mathrm{i}\exp\left[\mathrm{i}\frac{(\omega_{ml}-\omega)}{2}t\right]\frac{\sin[(\omega_{ml}-\omega)t/2]}{(\omega_{ml}-\omega)/2}$$

跃迁概率为

$$W_{l\to m}(t)=\frac{\mid F'_{ml}\mid^2}{\hbar^2}\mid B_+ + B_-\mid^2$$

$$= \frac{|F'_{ml}|^2}{\hbar^2}[|B_+|^2 + |B_-|^2 + 2\mathrm{Re}(B_+^* B_-)]$$

$$= \frac{|F'_{ml}|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin^2[(\omega_{ml}+\omega)t/2]}{[(\omega_{ml}+\omega)/2]^2} + \frac{\sin^2[(\omega_{ml}-\omega)t/2]}{[(\omega_{ml}-\omega)/2]^2} + 2\mathrm{Re}(B_+^* B_-)\right\}$$

当 $t\to\infty$ 时,第一、二项趋向于 $t\delta(\omega_{ml}+\omega)$ 和 $t\delta(\omega_{ml}-\omega)$,第三项为零,故

$$W_{l\to m}(t) = \frac{2\pi |F'_{ml}|^2}{\hbar^2} t[\delta(\omega_{ml}+\omega) + \delta(\omega_{ml}-\omega)] \tag{15.4.22}$$

跃迁速率为

$$w_{l\to m}(t) = \frac{2\pi |F'_{ml}|^2}{\hbar^2}[\delta(\omega_{ml}+\omega) + \delta(\omega_{ml}-\omega)] \tag{15.4.23}$$

当 $\varepsilon_m > \varepsilon_l$ 时,第一个 δ 函数为零,终态能量大于初态能量,故表示吸收 $\hbar\omega$ 能量,系统从 l 态跃迁到 m 态;反之,$\varepsilon_m < \varepsilon_l$ 时,第二个 δ 函数为零,终态能量小于初态能量,表示放出 $\hbar\omega$ 能量,系统从 l 态跃迁到 m 态. 式(15.4.23)可写成

$$w_{l\to m}(t) = \frac{2\pi |F'_{ml}|^2}{\hbar}\delta(\varepsilon_m - \varepsilon_l \pm \hbar\omega) \tag{15.4.24}$$

注意:这一结果说明,系统吸收 $\hbar\omega$ 能量与放出 $\hbar\omega$ 能量的概率是一样的,只决定于微扰矩阵元 $F'_{ml} = (\psi_m, \hat{F}'\psi_l)$.

光的吸收和受激辐射:光照到原子上,会产生散射(即吸收和辐射),第 12 章我们用经典的电磁理论讨论了原子对光的散射,得到了偶极求和定则,即式(12.1.25). 本节我们用半经典理论讨论. 之所以称**半经典理论**,其原因是:我们把入射光仍然用经典的电磁波来描述,而把其对原子的作用看作量子微扰. 事实上,光的静止质量为零,是相对论的,因此严格的理论应该用量子电动力学,把辐射场量子化.

设入射光是单色平面波:$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 \exp[\mathrm{i}(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]$,忽略磁场部分的作用力,并且假定光波波长远大于原子线度(注意:对 X 光近似不成立),原子的能量增加,即 Hamilton 函数的微扰部分为

$$\hat{H}' = e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r} = e\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r}\cos\omega t = -\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_0\cos\omega t \tag{15.4.25}$$

其中 $\boldsymbol{p} = -e\boldsymbol{E}_0\cdot\boldsymbol{r}$ 是原子的电偶极矩. 由式(15.4.24),原子从 ε_τ 态跃迁到 ε_σ 态的概率为(设 $\varepsilon_\sigma > \varepsilon_\tau$,仅考虑吸收,辐射概率是一样的;注意:这里用 τ、σ 分别代替初态 l 和终态 m,是为了区别于氢原子的量子数,τ 和 σ 代表一组量子数).

$$\begin{aligned} w_{\tau\to\sigma}(t) &= \frac{2\pi |F'_{\sigma\tau}|^2}{\hbar}\delta(\varepsilon_\sigma - \varepsilon_\tau - \hbar\omega) \\ &= \frac{\pi |\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_0|^2_{\sigma\tau}}{2\hbar}\delta(\varepsilon_\sigma - \varepsilon_\tau - \hbar\omega) \end{aligned} \tag{15.4.26}$$

其中

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_0|_{\sigma\tau} &= |\langle\psi_\sigma|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{E}_0|\psi_\tau\rangle| = |\langle\psi_\sigma|\boldsymbol{p}|\psi_\tau\rangle\cdot\boldsymbol{E}_0| \\ &\equiv |\boldsymbol{p}_{\sigma\tau}\cdot\boldsymbol{E}_0| = |\boldsymbol{p}_{\sigma\tau}|E_0\cos\vartheta \end{aligned} \tag{15.4.27}$$

式中 ϑ 为微扰矩阵元 $\boldsymbol{p}_{\sigma\tau}=\langle\psi_\sigma|\boldsymbol{p}|\psi_\tau\rangle$ 与 $\boldsymbol{E}_0$ 的夹角. 考虑：

(1) 入射光的偏振方向是随机的，那么对 ϑ 作空间平均为

$$\overline{\cos^2\vartheta}=\frac{1}{4\pi}\iint\cos^2\vartheta\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\cos^2\vartheta\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\mathrm{d}\varphi=\frac{1}{3}\qquad(15.4.28)$$

(2) 入射光是非单色的电磁波

$$I(\omega)=\varepsilon_0\,\overline{E^2}=\frac{1}{2}\varepsilon_0E_0^2\qquad(15.4.29)$$

把以上三式代入方程(15.4.26)得到

$$\begin{aligned}\overline{w_{\sigma\to\tau}}&=\frac{\pi}{6\hbar}\int\frac{2}{\varepsilon_0}\mid\boldsymbol{p}\mid_{\sigma\tau}^2I(\omega)\delta(\varepsilon_{\sigma\tau}-\hbar\omega)\mathrm{d}\omega\\&=\frac{\pi}{3\hbar^2\varepsilon_0}\mid\boldsymbol{p}\mid_{\sigma\tau}^2I(\omega_{\sigma\tau})\end{aligned}\qquad(15.4.30)$$

其中 $\varepsilon_{\sigma\tau}=\varepsilon_\sigma-\varepsilon_\tau$ 和 $\hbar\,\omega_{\sigma\tau}=\varepsilon_{\sigma\tau}$. 因此跃迁速率与入射光中角频率为 $\omega_{\sigma\tau}$ 光的强度 $I(\omega_{\sigma\tau})$ 成正比，而与其他频率成分无关. 定义吸收系数(称为**受激吸收**)

$$B_{\sigma\tau}=\frac{\pi}{3\hbar^2\varepsilon_0}\mid\boldsymbol{p}\mid_{\sigma\tau}^2\qquad(15.4.31)$$

显然，由 H' 的 Hermite 性质，辐射系数(称为**受激辐射**) $B_{\tau\sigma}=B_{\sigma\tau}$.

选择定则：受激吸收系数或受激发射系数与电偶极矩的矩阵元平方 $|\boldsymbol{p}|_{\sigma\tau}^2$ 成正比. 当 $|\boldsymbol{p}|_{\sigma\tau}^2=0$ 时，$B_{\tau\sigma}=B_{\sigma\tau}=0$，$|\boldsymbol{p}|_{\sigma\tau}^2$ 是否为零决定于初态 ψ_τ 和终态 ψ_σ 的量子数. 以氢原子为例：初态与终态分别为 $|nlm\rangle$ 和 $|n'l'm'\rangle$，那么电偶极矩的矩阵元为

z 方向分量：$\langle n'l'm'\mid r\cos\vartheta\mid nlm\rangle$

x 和 y 方向分量：$\langle n'l'm'\mid r\sin\vartheta\exp(\pm\mathrm{i}\varphi)\mid nlm\rangle$

当 (n,n')，(l,l') 和 (m,m') 满足一定关系时，矩阵元才不为零. 利用球谐函数 $Y_{ml}(\vartheta,\varphi)$ 的递推关系和正交性，可以证明只有当

$$\Delta l=l'-l=\pm1;\quad\Delta m=m'-m=0,\pm1\qquad(15.4.32)$$

时矩阵元才不为零. 上式称为**偶极辐射选择定则**. 注意：①偶极辐射选择定则与主量子数无关；②当考虑的光波长与原子线度可比时，入射场中 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$ 项不能忽略，必须考虑多极相互作用.

以上我们讨论了原子的受激吸收和受激辐射. 事实上，即使没有入射光，原子也能从高能级跃迁到低能级而发射光子，称为**自发辐射**. 自发辐射与初等量子力学的结论是矛盾的. 因为根据量子力学，处于定态的原子，没有外界的微扰是不可能从高能级跃迁到低能级的. 必须用量子电动力学才能解释原子的自发辐射. 但 Einstein 提出了一个唯象理论，求出了自发辐射系数. 我们不展开这方面的讨论.

习 题 15

15.1 用一级微扰法计算宽度为 a 的无限深势阱中粒子的基态、第一激发态

和第二激发态能量.设势阱的右下角被“切去”.(提示:微扰为 $H'=V_0x/a$)

答案:$\Delta E_{1,2,3}=V_0/2$.

15.2 长为 l 的轻绳子,一端系质量为 m 的质点,另一端固定.在重力作用下摆动.(1) 在小角度近似下求系统的能级和相应的波函数;(2) 求小角度近似引起的基态能量误差.

答案:$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\omega=\sqrt{\frac{g}{l}};E_1'=\frac{\hbar^2}{32ml^2}$.

15.3 考虑耦合谐振子:$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$,其中

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2+x_2^2);\quad \hat{H}'=-\lambda x_1x_2$$

(1) 求 $\hat{H}_0$ 的本征函数和本征值;(2) 用微扰法求第一激发态的一级能量修正;(3) 严格求 $\hat{H}$ 的本征值,并与微扰计算比较.(提示:令 $x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\eta);x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\eta)$)

15.4 设 Hamilton 函数在能量表象中的矩阵为

$$H=\begin{bmatrix}E_1^0+a & b\\ b & E_2^0+a\end{bmatrix}$$

其中 a 和 b 为实数.(1) 用微扰法求能量的一级修正;(2) 直接求能量本征值的精确解,并与(1)的结果比较.

答案:$E_1=E_1^0+a+\frac{b^2}{E_1^0-E_2^0};\quad E_2=E_2^0+a-\frac{b^2}{E_1^0-E_2^0}$.

15.5 两个粒子质量都为 m,禁闭在宽度为 L 的无限深势阱中.(1) 求系统的基态和第一激发态的能量(即至少有一个粒子被激发);(2) 加一个形如 $V_{12}=\lambda\delta(x_1-x_2)$的相互作用势,用微扰法求基态和第一激发态的能量和波函数.(提示:基态是非简并的,而第一激发态是二重简并的)

答案:$E_{11}=\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2},\quad E_{12}=\frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2}=E_{21};\quad E_{11}'=\frac{3\lambda}{2L},\quad E_+'=\frac{2\lambda}{L},\quad E_-'=0$.

15.6 假定原子核有限大小,半径为 $r_h=10^{-13}\,\text{cm}$,那么氢原子核外电子的势为

$$U(r)=\begin{cases}-\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}, & r>r_h\\ \dfrac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r_h}\left[\left(\dfrac{r}{r_h}\right)^2-3\right], & r<r_h\end{cases}$$

把核的有限大小看作微扰,求氢原子基态能量的一级修正.(提示:积分中取近似 $\exp(-r/a_0)\approx1$)

答案:$E_{10}'\approx\frac{2e^2r_h^2}{20\pi\varepsilon_0a_0^3}$.

15.7　对非简谐振子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \lambda x^4$$

取试探函数为

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{a^2x^2}{2}\right)$$

a 为变分参数. 用变分法求基态能量.

答案: $\frac{3^{4/3}}{4}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}\lambda^{1/3}$.

15.8　取试探函数为 $\psi_0(x)=C\exp(-ax^2)$，a 为变分参数，用变分法求谐振子基态能量和波函数.

15.9　一个质量为 m 的粒子在长度为 l 的一维箱中. 假设粒子处于能量为 E_n 的本征态中，在极短的时间内，箱长变为 $2l$. 求在此以后该粒子仍处于能量 E_n 本征态的概率.（提示：因变化过程时间极短，波函数为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi x}{l}, & 0 \leqslant x < l \\ 0, & l < x \leqslant 2l \end{cases}$$

然后用新的本征函数展开）

答案: $P=1/2$.

15.10　考虑一个二能级系统，Hamilton 函数在 $\hat{H}_0$ 表象中为

$$\hat{H}_0 = \begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix}$$

设 $t=0$ 时刻体系处于基态，后受到微扰作用

$$\hat{H}' = \begin{bmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma & \beta \end{bmatrix}$$

求以后体系处于激发态的概率.

15.11　有一个二能级系统，能级差为 $E_2-E_1=\hbar\omega_{12}$，态函数为 ψ_1 和 ψ_2. 开始时原子处于 ψ_1 态. 现受到电磁辐射 $\boldsymbol{E}=2\boldsymbol{E}_0\cos(\omega t)$微扰. (1) 若 $\omega=\omega_{12}$求以后粒子处于 ψ_2 的概率；(2) 若 $\omega\approx\omega_{12}$求以后粒子处于 ψ_2 的概率.

15.12　考虑一个最初处于基态 ψ_0 的任意量子力学体系，在 $t=0$ 时刻，加上形式为 $H'(t)=H_0\exp(-t/\tau)$的扰动. 证明在很长时间后，系统处于态 ψ_1 的概率为

$$P_{10} = \frac{|\langle\psi_0 \mid H_0 \mid \psi_1\rangle|^2}{(\hbar/\tau)^2+(\Delta\varepsilon)^2}, \quad \Delta\varepsilon = \hbar\omega_{12}$$

第 16 章　自旋和角动量

在经典力学中，把宏观粒子看作质点而不考虑粒子的内部结构，因此自由粒子的运动状态只要 3 个空间自由度就能描述. 但对微观粒子，实验发现还必须增加一个新的自由度，才能完全描述它的运动状态. 这个自由度具有角动量的性质，称为**自旋**. 粒子的自旋与粒子的空间运动状态无关，是一个独立的自由度. 宏观物体的角动量一般与物体的曲线运动有关，既然自旋具有角动量的性质，那么能否把自旋看作是微观粒子的自转引起的呢？就像地球的自转一样. 理论和实验表明，这一比拟是不正确的. 以电子为例，如果把电子的自旋认为是由电子的自转产生的，那么它的表面速度远大于光速，这是不可能的. 微观粒子的自旋性质非常重要，特别是它的自旋性质影响由它组成的宏观系统的统计性质，这一点以后再讨论. 必须指出：在非相对论量子力学中，电子的自旋是作为一个新的自由度引进的；在相对论量子力学中，自旋无须人为引进，它自然地包含在运动方程中.

16.1　电子的自旋算符和自旋波函数

电子的自旋具有下列特性：

1. 自旋是电子的一个新自由度，不能用坐标、动量、时间等变量表示；

2. 自旋是角动量，满足角动量算符的一般对易关系式(14.1.22)，而且实验表明，电子自旋在空间任何方向的投影只取$\pm\hbar/2$，故简称电子的自旋为 1/2；

3. 自旋完全是量子效应而无经典的对应量.

我们首先讨论电子自旋状态的描述，然后寻找自旋算符的表达式.

自旋态的描述：选取空间任意方向为 z 方向，电子自旋在 z 方向的投影 s_z 只取$\pm\hbar/2$ 两个值，以 s_z 为描述自旋的独立变量，那么电子状态的波函数包括自旋变量后为 $\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)$. 因为变量 s_z 只能取两个值，即

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\equiv\psi\left(\boldsymbol{r},t,+\frac{\hbar}{2}\right);\quad \psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\equiv\psi\left(\boldsymbol{r},t,-\frac{\hbar}{2}\right)\qquad(16.1.1)$$

以此可以构成一个 1×2 矩阵直接把自旋变量的取值表示出来

$$\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)=\begin{bmatrix}\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\\ \psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}\qquad(16.1.2)$$

称为**旋量波函数**. 其物理意义为：$|\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)|^2$ 和 $|\psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)|^2$ 分别表示 t 时刻，电子在 $\boldsymbol{r}$ 处且自旋向上($s_z=+\hbar/2$)或者向下($s_z=-\hbar/2$)的概率密度. 而空间积分

$$\int |\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r};\quad \int |\psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{16.1.3}$$

分别表示 t 时刻,电子自旋向上或向下的概率.归一化条件为

$$\begin{aligned}\sum_{s_z}\int |\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} &= \int\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t,s_z)\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\ &= \int |\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}+\int |\psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=1\end{aligned} \tag{16.1.4}$$

那么旋量波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)$满足的方程怎样呢?为此必须求出描述电子自旋的算符表达式.首先考虑 Hamilton 量不含自旋或者波函数中空间部分与自旋变量可分离情况,即

$$\psi(\boldsymbol{r},t,s_z) = \psi(\boldsymbol{r},t)\chi(s_z) \tag{16.1.5}$$

上式与方程(16.1.2)比较,$\chi(s_z)$的一般形式为

$$\chi(s_z) = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{16.1.6}$$

可分解为

$$\chi(s_z) = a\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + b\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \equiv a\chi_+ + b\chi_- \tag{16.1.7}$$

其中

$$\chi_+ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},\quad \chi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{16.1.8}$$

显然 χ_+ 和 χ_- 应该是自旋在 z 方向的投影 s_z 对应算符 $\hat{S}_z$ 的本征函数.事实上,由例 14.4.1,在算符 $\hat{S}_z$ 的自身表象中,$\hat{S}_z$ 的矩阵表示为式(14.4.25),即

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{16.1.9}$$

不难证明 $\hat{S}_z\chi_+ = \hbar\chi_+/2$ 和 $\hat{S}_z\chi_- = -\hbar\chi_-/2$,故 χ_+ 和 χ_- 确实为 $\hat{S}_z$ 的本征函数,相应的本征值为$\pm\hbar/2$.

自旋算符:自旋既然是一种角动量,自旋算符 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 必须满足对易关系式(14.1.22),即

$$\hat{\boldsymbol{S}}\times\hat{\boldsymbol{S}} = \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{S}} \tag{16.1.10}$$

为了方便,引进无量纲的 Pauli 算符 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \tag{16.1.11}$$

由方程(14.1.21)得到分量形式的对易关系式

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$$
$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_x \tag{16.1.12}$$
$$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_y$$

由于$\hat{\boldsymbol{S}}$在空间任何方向的投影只取$\pm\hbar/2$，任意选定x,y和z方向后，$\hat{\sigma}_\gamma(\gamma=x,y,z)$的本征值都为$\pm1$，显然$\hat{\sigma}_\gamma^2(\gamma=x,y,z)$的本征值为$+1$，即$\hat{\sigma}_\gamma^2$为**恒等算符**

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{I} \tag{16.1.13}$$

为了证明上式，设$\hat{\sigma}_\gamma(\gamma=x,y,z)$的本征函数为$\chi_1$和$\chi_2$(对应的本征值为$+1$和$-1$). 任意的自旋波函数$\chi$都可以用$\hat{\sigma}_\gamma$的本征函数展开

$$\chi = a\chi_1 + b\chi_2 \tag{16.1.14}$$

故

$$\hat{\sigma}_\gamma\chi = a\hat{\sigma}_\gamma\chi_1 + b\hat{\sigma}_\gamma\chi_2 = a\chi_1 - b\chi_2$$
$$\hat{\sigma}_\gamma^2\chi = \hat{\sigma}_\gamma(\hat{\sigma}_\gamma\chi) = a\hat{\sigma}_\gamma\chi_1 - b\hat{\sigma}_\gamma\chi_2 = a\chi_1 + b\chi_2 = \chi \tag{16.1.15}$$

所以$\hat{\sigma}_\gamma^2$是恒等算符. 因此自旋平方算符为

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4}\hat{I} \tag{16.1.16}$$

即$S^2=3\hbar^2/4$.

方程(16.1.12)中第一式分别左乘和右乘$\hat{\sigma}_x$且利用式(16.1.13)得到

$$\hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z$$
$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_y = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x \tag{16.1.17}$$

两式相加得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = 0 \tag{16.1.18}$$

同样可得类似的关系式

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = 0$$
$$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = 0 \tag{16.1.19}$$

联合方程(16.1.12)与(16.1.18)、(16.1.19)得到

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = \mathrm{i}\hat{\sigma}_z$$
$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y = \mathrm{i}\hat{\sigma}_x \tag{16.1.20}$$
$$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z = \mathrm{i}\hat{\sigma}_y$$

另外，自旋算符必须是 Hermite 算符，即

$$\boldsymbol{\sigma}^\dagger = \boldsymbol{\sigma} \tag{16.1.21}$$

根据以上诸式，我们来求自旋算符的矩阵表达形式. 在算符$\hat{\sigma}_z$自身表象中，由方程(16.1.9)

$$\hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{16.1.22}$$

设

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \tag{16.1.23}$$

由 $\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z$ 得到

$$\begin{bmatrix} a & b \\ -c & -d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a & b \\ -c & d \end{bmatrix} \tag{16.1.24}$$

故 $a=d=0$. 又由厄密性 $\hat{\sigma}_x^\dagger = \hat{\sigma}_x$ 得到 $c=b^*$. 因而

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{bmatrix} \tag{16.1.25}$$

又 $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{I}$,即

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{16.1.26}$$

故 $|b|=1$,即 $b=\exp(\mathrm{i}\vartheta)$,取 $\vartheta=0$,则

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{16.1.27}$$

再由 $\hat{\sigma}_y = -\mathrm{i}\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x$ 得到 $\hat{\sigma}_y$. 于是在 $\hat{\sigma}_z$ 表象(称 Pauli 表象)中自旋的矩阵表示为

$$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{16.1.28}$$

称为 **Pauli 矩阵**.

例 16.1.1 在 $\hat{\sigma}_z$ 表象中,求 $\hat{\sigma}_x$ 和 $\hat{\sigma}_y$ 的归一化本征函数.

解: 在 $\hat{\sigma}_z$ 表象中,$\hat{\sigma}_x$ 和 $\hat{\sigma}_y$ 的矩阵表示为式(16.1.28). 设 $\hat{\sigma}_x$ 和 $\hat{\sigma}_y$ 的本征矢量分别为

$$\xi = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}; \quad \zeta = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} \tag{16.1.29}$$

相应的本征值为 σ_x 和 σ_y,由式(16.1.28)

$$\hat{\sigma}_x\xi = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \sigma_x\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y\zeta = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \sigma_y\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} \tag{16.1.30}$$

求解上式中两个矩阵的本征值问题得到

1. $\hat{\sigma}_x$ 的两个本征值分别为 $\sigma_x = \pm 1$,相应的本征函数为

$$\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad \xi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{16.1.31}$$

2. $\hat{\sigma}_y$ 的两个本征值分别为 $\sigma_y = \pm 1$,相应的本征函数为

$$\zeta_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{bmatrix}; \quad \zeta_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{bmatrix} \tag{16.1.32}$$

例 16.1.2　在某自旋态$|\lambda\rangle$中测量$S_z=\hbar/2$的概率为 1/3，测量$S_x=\hbar/2$的概率为 1/6. 求$|\lambda\rangle$和$\langle\lambda|\hat{S}_y|\lambda\rangle$.

解：　由于在自旋态$|\lambda\rangle$中测量$S_z=\hbar/2$的概率为 1/3，所以在$\hat{S}_z$表象中$|\lambda\rangle=[1/\sqrt{3},b]^{\mathrm{T}}$；由归一化条件：$\langle\lambda|\lambda\rangle=1/3+|b|^2=1$，得$b=\sqrt{2/3}\exp(\mathrm{i}\delta)$，故$|\lambda\rangle$的形式为

$$|\lambda\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\end{bmatrix}\tag{16.1.33}$$

由上例，测量$S_x=\hbar/2$的概率

$$|\langle\xi_+|\lambda\rangle|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}[1,1]\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\end{bmatrix}\right|^2=\frac{1}{6}\tag{16.1.34}$$

从上式得到$\cos\delta=-\sqrt{2}/2$，即$\delta=\pm3\pi/4$. 故

$$|\lambda_\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{e}^{\pm3\pi\mathrm{i}/4}\end{bmatrix}\tag{16.1.35}$$

由$\hat{S}_y$的矩阵表示可直接得到

$$\langle\lambda_\pm|\hat{S}_y|\lambda_\pm\rangle=\lambda_\pm^\dagger\hat{S}_y\lambda_\pm=\pm\frac{1}{3}\hbar\tag{16.1.36}$$

值得指出的是：本节讨论了自旋为 1/2 的电子，z方向只有两个投影$s_z=\pm\hbar/2$，因此，$\hat{S}_x$，$\hat{S}_y$和$\hat{S}_z$是2×2矩阵. 一般，对自旋为s(整数)的粒子，z方向有$(2s+1)$投影，$\hat{S}_x$，$\hat{S}_y$和$\hat{S}_z$是$(2s+1)\times(2s+1)$矩阵. 例如$s=1$的ρ介子，z方向有三个投影$s_z=+\hbar,0,-\hbar$，$\hat{S}_x$，$\hat{S}_y$和$\hat{S}_z$是3×3矩阵. 在$\hat{S}_z$表象中(习题 16.13)

$$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix};\quad\hat{S}_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix};\quad\hat{S}_z=\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}\tag{16.1.37}$$

16.2　Pauli 方程和恒定磁场中电子的运动

我们得到了自旋算符$\hat{\boldsymbol{S}}$在$\hat{S}_z$表象中的矩阵表达式. 旋量波函数$\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)$实质上是在坐标表象中描述粒子的时空性质而在$\hat{S}_z$表象中描述粒子的自旋性质，是混合表象中的波函数. 显然 Hamilton 算符可能包含三种形式的算符：

1. 描述粒子时空运动的部分，例如动能算符，它们与自旋态无关，无论对$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)$还是$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)$都是一样求导或相乘，可以把这种算符写成$2\times2$的对角矩

阵，而且对角元素相同，例如

$$\hat{H}_0\hat{I}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{r},t)\right]\hat{I}\equiv\begin{bmatrix}\hat{H}_0 & 0\\ 0 & \hat{H}_0\end{bmatrix}\tag{16.2.1}$$

它对旋量波函数的作用为

$$\begin{bmatrix}\hat{H}_0 & 0\\ 0 & \hat{H}_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\\ \psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\hat{H}_0\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\\ \hat{H}_0\psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}\tag{16.2.2}$$

2. 描述粒子自旋运动的部分，它们是一些 2×2 的矩阵，对旋量波函数的作用相当于矩阵相乘.

3. 时空运动与自旋运动耦合部分，例如 $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$，既有求导又有矩阵等运算. 以 $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$ 为例，可以写作

$$\begin{aligned}2\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}&=\hbar\hat{L}_x\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}+\hbar\hat{L}_y\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}+\hbar\hat{L}_z\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}\hbar\hat{L}_z & \hbar(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)\\ \hbar(\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y) & -\hbar\hat{L}_z\end{bmatrix}\end{aligned}\tag{16.2.3}$$

故也可以写成 2×2 矩阵.

总之，在混合表象中，Hamilton 算符是一个 2×2 矩阵

$$\hat{H}=\begin{bmatrix}H_{11} & H_{12}\\ H_{21} & H_{22}\end{bmatrix}\tag{16.2.4}$$

于是，Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\\ \psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}H_{11} & H_{12}\\ H_{21} & H_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\psi^{(1)}(\boldsymbol{r},t)\\ \psi^{(2)}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}\tag{16.2.5}$$

上式称为 **Pauli 方程**. 如果轨道运动与自旋运动不耦合，即

$$\hat{H}=\hat{H}_L\hat{I}+\hat{H}_S\tag{16.2.6}$$

波函数分离为

$$\psi(\boldsymbol{r},t,s_z)=\psi(\boldsymbol{r},t)\chi(s_z)=\psi(\boldsymbol{r},t)\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}\tag{16.2.7}$$

代入方程(16.2.5)得到

$$\mathrm{i}\hbar\left(\chi\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)=\chi\hat{H}_L\psi+\psi\hat{H}_S\chi\tag{16.2.8}$$

两边除以 ψ 并且左乘 $\chi^\dagger$ 得到

$$\frac{1}{\psi}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-\hat{H}_L\psi\right)=\chi^\dagger\left(\hat{H}_S\chi-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}\right)\tag{16.2.9}$$

其中已利用了归一化条件 $\chi^{\dagger}\chi=1$,上式成立的条件是两边等于同一常数,根据不含自旋的 Schrödinger 方程,显然应令常数为零,即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}_L\psi;\quad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=\hat{H}_S\chi \tag{16.2.10}$$

故各自的波函数由各自的 Schrödinger 方程决定.

例 16.2.1　电子在恒定磁场中的运动.

解:　实验表明,与电子自旋角动量相应的磁矩为

$$\boldsymbol{M}_s=-\frac{e}{m_e}\boldsymbol{S}=-\frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma} \tag{16.2.11}$$

称为电子的**内禀磁矩**,是电子固有的性质,与电子的空间运动状态无关. 由式(8.3.47),内禀磁矩在恒定磁场中的有效势能

$$U=-\boldsymbol{M}_s\cdot\boldsymbol{B}=\frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.2.12}$$

注意:由式(8.3.33),电子的轨道运动引起的磁矩为

$$\boldsymbol{M}_L=-\frac{1}{2}\int\boldsymbol{r}'\times ev\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=-\frac{1}{2}\frac{e}{m_e}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=-\frac{1}{2}\frac{e}{m_e}\boldsymbol{L}$$

故 $|\boldsymbol{M}_L|/|\boldsymbol{L}|=e/(2m_e)$,而对自旋磁矩 $|\boldsymbol{M}_s|/|\boldsymbol{S}|=e/m_e$,两者差一个 1/2 因子. 由方程(11.4.50),带电粒子(注意:电子电量为 $-e$)的 Hamilton 函数为

$$H=\frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{P}+e\boldsymbol{A})^2+U=\frac{1}{2m_e}(\boldsymbol{P}+e\boldsymbol{A})^2+\frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.2.13}$$

相应的定态 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{1}{2m_e}(\hat{\boldsymbol{P}}+e\boldsymbol{A})^2+\frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi=E\psi \tag{16.2.14a}$$

注意:(1) 量子化对正则动量 $\boldsymbol{P}$ 进行,即把正则动量换成动量算符 $\hat{\boldsymbol{P}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$;(2) 上式中平方项的定义为

$$(\hat{\boldsymbol{P}}+e\boldsymbol{A})^2=\hat{\boldsymbol{P}}^2+e^2\boldsymbol{A}^2+e(\hat{\boldsymbol{P}}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}) \tag{16.2.14b}$$

一般 $\hat{\boldsymbol{P}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 不对易

$$\hat{\boldsymbol{P}}\cdot\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A} \tag{16.2.14c}$$

利用电磁波的横波条件 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$,方程(16.2.14a)可以写成

$$\left[\frac{1}{2m_e}(\hat{\boldsymbol{P}}^2+2e\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}+e^2\boldsymbol{A}^2)+\frac{e\hbar}{2m_e}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi=E\psi \tag{16.2.14d}$$

取恒定磁场为 z 方向,磁场的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 可写成 $\boldsymbol{A}=-By\boldsymbol{e}_x$(见习题 8.9),代入式(16.2.14a)得到

$$\left[\frac{1}{2m_e}[(\hat{P}_x-eBy)^2+\hat{P}_y^2+\hat{P}_z^2]+\frac{e\hbar}{2m_e}B\hat{\sigma}_z\right]\psi=E\psi \tag{16.2.15}$$

注意上式中 $\hat{\sigma}_z$ 为 2×2 矩阵,故 ψ 应该为 2×1 的矩阵 $\psi=[\psi_1,\psi_2]^{\mathrm{T}}$

$$\psi = \begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{bmatrix} = \psi_1\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} + \psi_2\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \psi_1\chi_+ + \psi_2\chi_- \tag{16.2.16}$$

代入式(16.2.15)得

$$\left\{\frac{1}{2m_e}\left[(\hat{P}_x - eBy)^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2\right] \pm \frac{e\hbar}{2m_e}B\right\}\psi_i = E\psi_i \tag{16.2.17}$$

其中,$i=1,2$. 因为$[\hat{P}_x,\hat{H}]=[\hat{P}_z,\hat{H}]=0$,故 P_x 和 P_z 为守恒量,即 x 和 z 方向的正则动量为常量,令上式的解为

$$\psi_{1,2}(x,y,z) = \phi(y)\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(P_x x + P_z z)\right] \tag{16.2.18}$$

代入式(16.2.17)得

$$\frac{1}{2m_e}\left[(P_x - eBy)^2 + \hat{P}_y^2\right]\phi(y) = \left(E - \frac{e\hbar B}{2m_e}\sigma_z - \frac{P_z^2}{2m_e}\right)\phi(y) \tag{16.2.19}$$

其中 $\sigma_z=\pm1$ 为 $\hat{\sigma}_z$ 的本征值. 上式整理后得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\mathrm{d}^2\phi(y)}{\mathrm{d}y^2} + \frac{1}{2}m_e\omega_c^2(y-y_0)^2\phi(y) = E'\phi(y) \tag{16.2.20}$$

其中

$$\omega_c = \frac{eB}{m_e};\quad y_0 = \frac{P_x}{eB};\quad E' = E - \frac{1}{2m_e}(e\hbar B\sigma_z + P_z^2) \tag{16.2.21}$$

显然式(16.2.20)是原点在 y_0 的谐振子方程,故能级为 $E'=(n+1/2)\hbar\omega_c$,即

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c + \frac{e\hbar B\sigma_z + P_z^2}{2m_e} \tag{16.2.22}$$

注意到能级与 P_x 无关而波函数 $\phi(y)$ 与 P_x 有关,给定 n,有无穷多个波函数相对应(因 P_x 可连续变化),故能级是无穷简并的. 当电子在 xOy 平面内运动且忽略自旋时,那么

$$E_n = (2n+1)\hbar\omega_L \tag{16.2.23}$$

式中 $\omega_L=\omega_c/2$ 称为 Larmor 频率. 上式称为 **Landau 能级**.

例 16.2.2 磁共振.

解: 设磁场有两部分组成:z 方向为恒定磁场 B_0,xOy 平面内为交变磁场,其振幅为 B_1,即 $\boldsymbol{B}=(B_1\cos\omega t, -B_1\sin\omega t, B_0)$. 设粒子的自旋为 1/2,与自旋角动量相应的内禀磁矩为

$$\boldsymbol{M}_s = \frac{q}{m}\boldsymbol{S} = \frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma} \equiv M_0\boldsymbol{\sigma} \tag{16.2.24}$$

式中 m 和 q(不一定是电子)分别为粒子质量和电荷,$M_0=q\hbar/(2m)$. 由式(8.3.47),内禀磁矩在外磁场中的有效势能为

$$U = -\boldsymbol{M}_s\cdot\boldsymbol{B} = -M_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \tag{16.2.25}$$

考虑粒子是定域的,可忽略空间运动部分,则 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=-M_0\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}=-M_0\ (\hat{\sigma}_xB_x+\hat{\sigma}_yB_y+\hat{\sigma}_zB_0)$$
$$=-M_0\left\{\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}B_1\cos\omega t-\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}B_1\sin\omega t+\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}B_0\right\}$$

即

$$\hat{H}=-M_0\begin{bmatrix}B_0&B_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\\B_1\exp(-\mathrm{i}\omega t)&-B_0\end{bmatrix}$$

现在不涉及到轨道运动，自旋波函数满足的 Shrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=\hat{H}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=-M_0\begin{bmatrix}B_0&B_1\exp(\mathrm{i}\omega t)\\B_1\exp(-\mathrm{i}\omega t)&-B_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}$$

展开后得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}&=\mathrm{i}\Omega a+\mathrm{i}\gamma\Omega\exp(\mathrm{i}\omega t)b\\\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t}&=-\mathrm{i}\Omega b+\mathrm{i}\gamma\Omega\exp(-\mathrm{i}\omega t)a\end{aligned}\tag{16.2.26}$$

其中 $\Omega=M_0B_0/\hbar$ 和 $\gamma=B_1/B_0$. 第一、二式分别消去 a 和 b 得到

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}^2a}{\mathrm{d}t^2}-\mathrm{i}\omega\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}+[(\gamma^2+1)\Omega-\omega]\Omega a=0\\&\frac{\mathrm{d}^2b}{\mathrm{d}t^2}+\mathrm{i}\omega\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t}+[(\gamma^2+1)\Omega-\omega]\Omega b=0\end{aligned}\tag{16.2.27}$$

假定初始条件为 $a(0)=1$ 和 $b(0)=0$(即自旋向上的态)，那么上式的解为

$$\begin{aligned}a(t)&=\left(\cos\Omega_1t+\mathrm{i}\frac{\Omega-\omega/2}{\Omega_1}\sin\Omega_1t\right)\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega}{2}t\right)\\b(t)&=\mathrm{i}\frac{\gamma\Omega}{\Omega_1}\sin\Omega_1t\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega}{2}t\right)\end{aligned}\tag{16.2.28}$$

其中

$$\Omega_1=\sqrt{\left(\Omega-\frac{\omega}{2}\right)^2+\gamma^2\Omega^2}\tag{16.2.29}$$

显然 $|a(t)|^2+|b(t)|^2=1$. 在 t 时刻，自旋向下的概率为

$$|\ b(t)\ |^2=\left(\frac{\gamma\Omega}{\Omega_1}\right)^2\sin^2\Omega_1t\tag{16.2.30}$$

当周期场的频率满足共振条件，即 $\omega=2\Omega$ 时，自旋向下的概率达到极大. 目前，磁共振已有大量应用.

16.3　电子自旋与轨道角动量的耦合

电子既有轨道角动量又有自旋角动量，自然要想到角动量合成问题. 原子光谱

实验也表明，只有考虑了电子轨道角动量与自旋角动量的耦合作用，才能解释实验结果. 电子轨道角动量 L^2 和 z 方向的投影 L_z 是量子化的

$$\begin{aligned} L^2 &= l(l+1)\hbar^2 \quad (l=0,1,2,\cdots) \\ L_z &= m\hbar \quad (m=0,\pm 1,\cdots,\pm l) \end{aligned} \tag{16.3.1}$$

而电子自旋角动量为

$$S^2 = 3\hbar^2/4;\quad S_z = \pm\hbar/2 \tag{16.3.2}$$

它们如何相加呢？设相加后的合角动量矢量为

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}} \tag{16.3.3}$$

显然对 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 也存在对易关系

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_z;\quad [\hat{J}_y,\hat{J}_z] = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_x;\quad [\hat{J}_z,\hat{J}_x] = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_y \tag{16.3.4}$$

事实上，因为 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 属于不同的自由度，故

$$[\hat{L}_\alpha,\hat{S}_\beta] = 0 \quad (\alpha,\beta = x,y,z)$$

于是

$$\begin{aligned} [\hat{J}_x,\hat{J}_y] &= [(\hat{L}_x+\hat{S}_x),(\hat{L}_y+\hat{S}_y)] = [\hat{L}_x,\hat{L}_y]+[\hat{S}_x,\hat{S}_y] \\ &= \mathrm{i}\hbar(\hat{L}_z+\hat{S}_z) = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_z \end{aligned}$$

与方程(14.1.25)的证明过程相同，同样有

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_\alpha] = 0 \quad (\alpha = x,y,z) \tag{16.3.5}$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{\boldsymbol{L}}^2 + \hat{\boldsymbol{S}}^2 + 2\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \tag{16.3.6}$$

因为在算符 $\hat{S}_z$ 的表象中，$\hat{\boldsymbol{S}}$ 为矩阵，故我们把上式写成矩阵的形式

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{J}}^2 = &\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}^2 & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{L}}^2 \end{bmatrix} + \frac{3}{4}\hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \hbar\hat{L}_x\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ &+ \hbar\hat{L}_y\begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} + \hbar\hat{L}_z\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{16.3.7}$$

即

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}^2 + 3\hbar^2/4 + \hbar\hat{L}_z & \hbar\hat{L}_- \\ \hbar\hat{L}_+ & \hat{\boldsymbol{L}}^2 + 3\hbar^2/4 - \hbar\hat{L}_z \end{bmatrix} \tag{16.3.8}$$

其中 $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\hat{L}_y$. 故 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 的本征方程为

$$\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}^2 + \dfrac{3\hbar^2}{4} + \hbar\hat{L}_z & \hbar\hat{L}_- \\ \hbar\hat{L}_+ & \hat{\boldsymbol{L}}^2 + \dfrac{3\hbar^2}{4} - \hbar\hat{L}_z \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \psi^{(1)}(\vartheta,\varphi) \\ \psi^{(2)}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix} = \lambda\hbar^2\begin{bmatrix} \psi^{(1)}(\vartheta,\varphi) \\ \psi^{(2)}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix}$$

(16.3.9)

λ 为本征值. 上式展开后得到

$$\left(\hat{\boldsymbol{L}}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\hat{L}_z\right)\psi^{(1)} + \hbar\hat{L}_- \psi^{(2)} = \lambda\hbar^2\psi^{(1)}$$

$$\hbar\hat{L}_+ \psi^{(1)} + \left(\hat{\boldsymbol{L}}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\hat{L}_z\right)\psi^{(2)} = \lambda\hbar^2\psi^{(2)} \tag{16.3.10}$$

因为球谐函数 $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$是 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征函数，利用关系(证明略)

$$\hat{L}_\pm Y_{lm} = \hbar\sqrt{(l\pm m+1)(l\mp m)}\,Y_{l(m\pm1)} \tag{16.3.11}$$

显然 $\hat{L}_\pm$ 对 Y_{lm}的作用使 Y_{lm}的量子数 m 上升 1(或下降 1)，故称 $\hat{L}_\pm$ 为上升或下降算符. 取

$$\psi^{(1)} = aY_{lm}(\vartheta,\varphi); \quad \psi^{(2)} = bY_{l(m+1)}(\vartheta,\varphi) \tag{16.3.12}$$

代入方程(16.3.10)得到

$$\left[l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \lambda\right]a + \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,b = 0 \tag{16.3.13a}$$

$$\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\,a + \left[l(l+1) + \frac{3}{4} - (m+1) - \lambda\right]b = 0 \tag{16.3.13b}$$

上式是关于 a 和 b 的齐次方程组，存在非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \lambda & \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \\ \sqrt{(l+m+1)(l-m)} & l(l+1) + \frac{3}{4} - (m+1) - \lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{16.3.14}$$

容易求得本征值为

$$\lambda_1 = \left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right); \quad \lambda_2 = \left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right) \tag{16.3.15}$$

或表示成

$$\lambda = j(j+1) \quad (j = l\pm 1/2) \tag{16.3.16}$$

因此总角动量平方的取值只有两个. 把 $j=l+1/2$ 和 $j=l-1/2$ 分别代入方程(16.3.13a)和(16.3.13b)得

$$\frac{a}{b} = \sqrt{\frac{l+m+1}{l-m}} \quad \left(j = l+\frac{1}{2}\right) \tag{16.3.17a}$$

$$\frac{a}{b} = -\sqrt{\frac{l-m}{l+m+1}} \quad \left(j = l-\frac{1}{2}\right) \tag{16.3.17b}$$

故相应的本征函数为

对 $j=l+1/2$：

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix} \sqrt{l+m+1}\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \\ \sqrt{l-m}\,Y_{l(m+1)}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix} \tag{16.3.18}$$

对 $j=l-1/2$：

$$\psi_2=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}-\sqrt{l-m}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\\ \sqrt{l+m+1}Y_{l(m+1)}(\vartheta,\varphi)\end{bmatrix} \tag{16.3.19}$$

另一方面，显然 $\hat{\boldsymbol{L}}^2\psi_{1,2}=l(l+1)\hbar^2\psi_{1,2}$，故上两式也是 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 的本征函数！再看总角动量的 z 分量的算符

$$\hat{J}_z=\hat{L}_z+\hat{S}_z \tag{16.3.20}$$

相应的矩阵形式为

$$\hat{J}_z=\begin{bmatrix}\hat{L}_z+\frac{\hbar}{2} & 0\\ 0 & \hat{L}_z-\frac{\hbar}{2}\end{bmatrix} \tag{16.3.21}$$

显然

$$\hat{J}_z\psi_{1,2}=(m+1/2)\hbar\psi_{1,2}\equiv m_j\hbar\psi_{1,2} \tag{16.3.22}$$

故 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 有共同的本征函数 ψ_1 和 ψ_2. 概括起来：$\hat{\boldsymbol{J}}^2$、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 有共同本征函数 ψ_{ljm_j}，对应的本征值为

$$J^2=j(j+1)\hbar^2,\quad L^2=l(l+1)\hbar^2,\quad J_z=m_j\hbar. \tag{16.3.23}$$

再看 m 的取值范围.

对 $j=l+1/2$：由式(16.3.18)知 m 的最大值只能取 $m_{\max}=l$，而最小值为 $m_{\min}=-(l+1)$. 相应地，m_j 的取值范围为

$$m_j=\left(l+\frac{1}{2}\right),\left(l-\frac{1}{2}\right),\cdots,-\left(l+\frac{1}{2}\right)=j,j-1,\cdots,-j \tag{16.3.24}$$

共有$(2j+1)$个可能取值. 波函数为

$$\begin{aligned}\psi_{ljm_j}&=\sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}+\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}}Y_{l(m+1)}(\vartheta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\\&=\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{bmatrix}\sqrt{j+m_j}Y_{l(m_j-1/2)}(\vartheta,\varphi)\\ \sqrt{j-m_j}Y_{l(m_j+1/2)}(\vartheta,\varphi)\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{16.3.25}$$

对 $j=l-1/2$：如果 m 的最大值取 $m_{\max}=l$，式(16.3.19)第一行为零，而第二行也为零(因为球谐函数中 $m>l$). 故最大值只能取 $m_{\max}=l-1$，同理最小值只能取 $m_{\min}=-l$. 相应地，m_j 的取值范围为

$$m_j=l-1+\frac{1}{2},l-\frac{3}{2},\cdots,-l+\frac{1}{2}=j,j-1,\cdots,-j \tag{16.3.26}$$

也有$(2j+1)$个可能取值，波函数为

$$\psi_{ljm_j} = -\sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} Y_{l(m+1)}(\vartheta,\varphi) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2j+2}} \begin{bmatrix} -\sqrt{j-m_j+1}\, Y_{l(m_j-1/2)}(\vartheta,\varphi) \\ \sqrt{j+m_j+1}\, Y_{l(m_j+1/2)}(\vartheta,\varphi) \end{bmatrix} \tag{16.3.27}$$

例 16.3.1　氢原子能级的精细结构.

解:　考虑电子自旋角动量与轨道角动量耦合后，Hamilton 算符为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(r) + \xi(r) \hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \equiv \hat{H}_0 + \hat{H}'$$
$$\xi(r) = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\mathrm{d}U(r)}{\mathrm{d}r} \tag{16.3.28}$$

其中 $\xi(r)$ 为相对论效应，可以把 $\hat{H}'$ 当作微扰来计算它对氢原子能级的影响. 问题是如何选择未微扰 Hamilton 算符 $\hat{H}_0$ 的本征函数呢? 如果仅考虑电子自旋而忽略自旋角动量与轨道角动量的耦合，那么电子的波函数显然为

$$\Psi_{nlmm_s}(r,\vartheta,\varphi,S_z) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\, \chi_{\pm}(S_z) \tag{16.3.29}$$

由于微扰前氢原子能级仅与量子数 n 有关而与 l、m 和 m_s 无关，故是一个简并微扰问题. 微扰矩阵元为

$$H'_{l'm'm'_s,lmm_s} = \int \Psi^{\dagger}_{nlmm_s} \Psi_{nl'm'm'_s} \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = I_{nl} \langle l'm'm'_s \mid \hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \mid lmm_s \rangle$$
$$= \frac{1}{2} I_{nl} \langle l'm'm'_s \mid \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2 \mid lmm_s \rangle \tag{16.3.30}$$

式中

$$I_{nl} = \int_0^{\infty} \mid R_{nl}(r) \mid^2 \xi(r) r^2 \mathrm{d}r$$

显然由于 Ψ_{nlmm_s} 不是 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 的本征函数，$H'_{l'm'm'_s,lmm_s}$ 的计算比较困难且也不是对角化的. 事实上，在微扰前，$\hat{H}_0$ 与 $\hat{L}^2$、$\hat{L}_z$ 和 $\hat{S}_z$ 均对易，n、l、m、m_s 都是好量子数. 但微扰后，$\hat{H}$ 含有 $\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}}$ 项，而 $\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_y \hat{S}_y$，故 $\hat{H}$ 不再与 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{S}_z$ 对易，m 和 m_s 不再是好量子数. 但 $2\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2$，而显然 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 均与 $\hat{H}$ 对易 ($\hat{\boldsymbol{S}}^2$ 是单位算符，与任何算符对易). 故考虑微扰后好量子数为 n, l, j 和 m_j. 因此选择 $\hat{H}_0$、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$、$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征函数作为微扰展开的基函数，那么微扰矩阵元就很容易计算而且是对角化的. 因方程(16.3.29)是 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 的本征函数，而 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 的本征值与 m 无关，由不同 m 线性组成的函数也一定是 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 的本征函数. 故由方程(16.3.29)来组成 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的本征函数是恰当的. 由方程(16.3.25)和(16.3.27)，显然取

$$\Psi_{nljm_j}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r) \psi_{ljm_j}(\vartheta,\varphi) \tag{16.3.31}$$

选择 Ψ_{nljm_j} 作为微扰展开的基函数后，久期方程为对角化方程

$$\sum_{ljm_j}[H'_{l'j'm'_j,ljm_j} - E^{(1)}\delta_{l'l}\delta_{j'j}\delta_{m'_jm_j}]C_{ljm_j} = 0 \tag{16.3.32}$$

其中

$$\begin{aligned} H'_{l'j'm'_j,ljm_j} &= \int \Psi^{\dagger}_{nljm_j}\Psi_{nl'j'm'_j}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = I_{nl}\langle l'j'm'_j \mid \hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} \mid ljm_j\rangle \\ &= \frac{1}{2}I_{nl}\langle l'j'm'_j \mid \hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2 \mid ljm_j\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2}I_{nl}\left[j(j+1) - l(l+l) - \frac{3}{4}\right] \end{aligned} \tag{16.3.33}$$

故得到能量的一级修正值为

$$E^{(1)} = H'_{l'j'm'_j,ljm_j} = \frac{\hbar^2}{2}I_{nl}\left[j(j+1) - l(l+l) - \frac{3}{4}\right] \tag{16.3.34}$$

可见微扰后能量不仅与 n 有关，而且与量子数 l 和 j 也有关，但仍然与 m_j 无关，简并没有完全消除. 对给定的 n 和 l，j 可以取 $j=l\pm1/2$ 两个值，故能级分成差别不大的两条. 相应的零级波函数为

对 $j=l+1/2$

$$\Psi_{nljm_j} = \frac{R_{nl}(r)}{\sqrt{2j}}\left[\sqrt{j+m_j}Y_{l(m_j-1/2)}\chi_+ + \sqrt{j-m_j}Y_{l(m_j+1/2)}\chi_-\right]$$

对 $j=l-1/2$

$$\Psi_{nljm_j} = \frac{R_{nl}(r)}{\sqrt{2j+2}}\left[-\sqrt{j-m_j+1}Y_{l(m_j-1/2)}\chi_+ + \sqrt{j+m_j+1}Y_{l(m_j+1/2)}\chi_-\right]$$

16.4　电子自旋与自旋的耦合

如果原子存在两个电子，用下标 1、2 表示电子 1 和电子 2 相应的量. 那么角动量的耦合可有多种，如 $\boldsymbol{L}_1$-$\boldsymbol{L}_2$ 耦合、$\boldsymbol{J}_1$-$\boldsymbol{J}_2$ 耦合、$\boldsymbol{S}_1$-$\boldsymbol{S}_2$ 耦合、$\boldsymbol{J}_1$-$\boldsymbol{L}_2$ 耦合等等. 是否需要考虑某种耦合，由它们相互作用的强度决定. 下面讨论两个电子的自旋角动量耦合，即 $\boldsymbol{S}_1$-$\boldsymbol{S}_2$ 耦合. 两个电子的总角动量算符为

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{S}}_1 + \hat{\boldsymbol{S}}_2 \tag{16.4.1}$$

我们来求 $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ 和 $\hat{S}_z$ 的共同本征函数. 设 S_{1z}和 S_{2z}的本征函数分别为

$$\chi_{1+} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \chi_{1-} = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix};\quad \chi_{2+} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \chi_{2-} = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{16.4.2}$$

由 $\chi_{1\pm}$ 和 $\chi_{2\pm}$ 可组成四个线性独立的函数

$$\chi_1 = \chi_{1+}\chi_{2+};\quad \chi_2 = \chi_{1+}\chi_{2-};\quad \chi_3 = \chi_{1-}\chi_{2+};\quad \chi_4 = \chi_{1-}\chi_{2-} \tag{16.4.3}$$

它们代表了两个电子的一切可能的自旋态，所以构成完备的函数集. 注意：因为 S_{1z} 和 S_{2z}是独立的自由度，S_{1z}作用在χ_i($i=1\sim4$)上时，只对$\chi_{1\pm}$作用；同理，S_{2z}作用在

$\chi_i(i=1\sim4)$上时，只对 $\chi_{2\pm}$ 作用，等等. 令 $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ 的本征函数为 χ，相应的本征值为 A

$$\chi=\sum_{i=1}^{4}C_i\chi_i \tag{16.4.4}$$

由本征方程 $\hat{\boldsymbol{S}}^2\chi=A\chi$ 得到

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{S}}^2\chi&=(\hat{\boldsymbol{S}}_1^2+\hat{\boldsymbol{S}}_2^2+2\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}+2\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}+2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})\chi\\&=\frac{3}{2}\hbar^2\chi+2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}+\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}+\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})\chi\\&=\frac{3}{2}\hbar^2\chi+2\sum_{i=1}^{4}C_i(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}+\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}+\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z})\chi_i\end{aligned} \tag{16.4.5}$$

注意到

$$\hat{S}_{1x}\chi_1=(\hat{S}_{1x}\chi_{1+})\chi_{2+}=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\chi_{2+}=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\chi_{2+}=\frac{\hbar}{2}\chi_{1-}\chi_{2+}=\frac{\hbar}{2}\chi_3$$

等关系，本征方程 $\hat{\boldsymbol{S}}^2\chi=A\chi$ 简化成

$$\hbar^2\left[2C_1\chi_1+(C_2+C_3)\chi_2+(C_2+C_3)\chi_3+3C_4\chi_4\right]=A\chi \tag{16.4.6}$$

上式分别左乘 $\chi_i^\dagger(i=1,2,3,4)$得到

$$\begin{aligned}(2\hbar^2-A)C_1&=0\\(\hbar^2-A)C_2+\hbar^2C_3&=0\\\hbar^2C_2+(\hbar^2-A)C_3&=0\\(2\hbar^2-A)C_4&=0\end{aligned} \tag{16.4.7}$$

齐次方程存在非零解的条件为系数行列式等于零，于是

$$(2\hbar^2-A)^3A=0 \tag{16.4.8}$$

故得到三重根 $A=2\hbar^2$ 和单重根 $A=0$. 下面求相应的本征函数.

单重根：由方程(16.4.7)，$C_1=C_4=0$，$C_2+C_3=0$，故

$$\chi=C_2(\chi_2-\chi_3)=C_2(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+}) \tag{16.4.9a}$$

C_2 由归一化条件 $\chi^\dagger\chi=1$ 决定

$$|C_2|^2(\chi_{2-}^+\chi_{1+}^+-\chi_{2+}^+\chi_{1-}^+)(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+})=2|C_2|^2=1 \tag{16.4.9b}$$

取 $C_2=1/\sqrt{2}$. 如果电子 1 与 2 对调后，波函数反号，故式(16.4.9)的波函数是反对称的，用下标 A 表示

$$\chi_{\mathrm{A}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+}) \tag{16.4.10}$$

显然

$$\hat{S}_z\chi_{\mathrm{A}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z})(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+})=0 \tag{16.4.11}$$

故 χ_A 也是 $\hat{S}_z$ 的本征函数，相应的本征值为零.

三重根：由方程(16.4.7)，$C_2=C_3$，C_1 和 C_4 任意，即

$$\chi = C_1\chi_{1+}\chi_{2+} + C_2(\chi_{1+}\chi_{2-} + \chi_{1-}\chi_{2+}) + C_4\chi_{1-}\chi_{2-} \tag{16.4.12}$$

如果要求 χ 是 $\hat{S}_z$ 的本征函数，C_1、C_2 和 C_4 中只能同时有一个不为零，这个不为零的常数由归一化条件决定. 最后得到

$$\begin{aligned} \chi_S^{(1)} &= \chi_{1+}\chi_{2+} \\ \chi_S^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1+}\chi_{2-} + \chi_{1-}\chi_{2+}) \\ \chi_S^{(3)} &= \chi_{1-}\chi_{2-} \end{aligned} \tag{16.4.13}$$

式中下标 S 表示对称波函数，即如果电子 1 与 2 对调后，波函数同号. $\chi_S^{(1)}$，$\chi_S^{(2)}$ 和 $\chi_S^{(3)}$ 分别对应于 $\hat{S}_z$ 的本征值为 $\hbar$，0 和 $-\hbar$.

故两个电子的总自旋和 z 方向投影可写成标准的形式：

$$S^2 = s(s+1)\hbar, \quad S_z = m_S\hbar \tag{16.4.14}$$

$s=0$：$m_S=0$(单态)；$s=1$：$m_S=1,0,-1$(三重态). 两个电子自旋组合的这四种状态可形象地用矢量图表示，如图 16.4.1. 在态 $\chi_S^{(1)}$ 和 $\chi_S^{(3)}$ 中两个电子的自旋平行(都向上和都向下)；在态 $\chi_S^{(2)}$ 和 χ_A 中两个电子的自旋反平行，但在态 $\chi_S^{(2)}$ 中合成的总自旋角动量不为零.

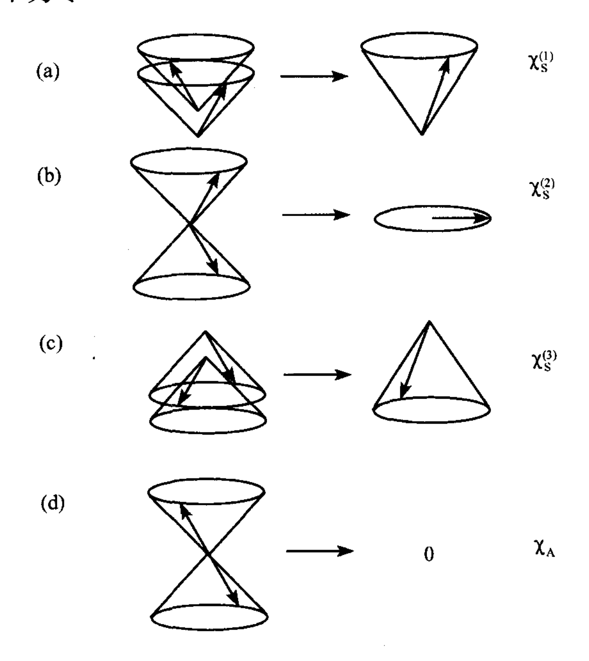


图 16.4.1　两个电子自旋相加的矢量模型

例 16.4.1　由两个自旋为 1/2 的体系，粒子 1 处于 $S_{1z}=\hbar/2$ 的本征态，粒子 2 处于 $S_{2x}=\hbar/2$ 的本征态. 求体系总自旋 S^2 的可能测量值及相应的概率.

解：　在 Pauli 表象中，$S_{1z}=\pm\hbar/2$ 的单粒子自旋本征态为

$$\chi_{1+}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}_1,\quad \chi_{1-}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}_1 \tag{16.4.15}$$

而由式(16.1.31)，$S_{2x}=\hbar/2$ 的本征态为

$$\xi_{2+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}_2+\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}_2\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{2+}+\chi_{2-}) \tag{16.4.16}$$

故体系的自旋态为

$$\psi(1,2)=\chi_{1+}\xi_{2+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{1+}(\chi_{2+}+\chi_{2-}) \tag{16.4.17}$$

另一方面，总自旋 S^2 有两个本征值 $S^2=0$ 和 2. $S^2=0$ 的本征态由式(16.4.10)给出，即

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+}) \tag{16.4.18}$$

因此在自旋态 $\psi(1,2)$ 中测得 $S^2=0$ 的概率为 $|\langle\chi_{00}|\psi(1,2)\rangle|^2$，而

$$\langle\chi_{00}\mid\psi(1,2)\rangle=\langle\chi_{00}\mid\chi_{1+}\xi_{2+}\rangle=\frac{1}{2}(\chi_{2+}^\dagger\chi_{1+}^\dagger\chi_{1+}-\chi_{2+}^\dagger\chi_{1-}^\dagger\chi_{1+})(\chi_{2+}+\chi_{2-})$$

利用正交性

$$\chi_{1+}^\dagger\chi_{1+}=1;\quad \chi_{1-}^\dagger\chi_{1+}=0;\quad \chi_{2+}^\dagger\chi_{2+}=1;\quad \chi_{2+}^\dagger\chi_{2-}=0 \tag{16.4.19}$$

故 $\langle\chi_{00}|\psi(1,2)\rangle=1/2$. 因此测得 $S^2=0$ 的概率为 1/4，从而测得 $S^2=2$ 的概率为 3/4.

习　题　16

16.1　求 $\hat{\sigma}_z$ 表象到 $\hat{\sigma}_x$ 表象的变换矩阵.（提示：$\hat{\sigma}_x$ 在 $\hat{\sigma}_z$ 表象和自身表象中的本征矢量分别为

$$\xi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix},\quad \xi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix};\quad \zeta_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \zeta_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

变换矩阵元为 $S_{\alpha\beta}=\langle\zeta_\alpha|\xi_\beta\rangle=\zeta_\alpha^\dagger\xi_\beta(\alpha,\beta=1,2)$）

答案：$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{bmatrix}=S^\dagger=S^{-1}$.

16.2　在 S_z 的本征态 $\chi_{1/2}$，求 $\overline{(\Delta S_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta S_y)^2}$.

答案：$\overline{(\Delta S_x)^2}=\overline{(\Delta S_y)^2}=\hbar^2/4$.

16.3 给定(ϑ,φ)方向的单位矢量

$$\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)=(\sin\vartheta\cos\varphi,\sin\vartheta\sin\varphi,\cos\vartheta)$$

求在σ_z表象中$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的本征函数和本征值.

答案:$\lambda_\pm=\pm1$;$\psi_+=\left[\cos\frac{\vartheta}{2}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}\right),\sin\frac{\vartheta}{2}\exp\left(\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}\right)\right]^{\mathrm{T}}$;

$$\psi_-=\left[\sin\frac{\vartheta}{2}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}\right),-\cos\frac{\vartheta}{2}\exp\left(\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}\right)\right]^{\mathrm{T}}.$$

16.4 (1) 电子处于自旋态$\chi_{1/2}$,求σ_n的可能值和相应的概率;(2) 电子处于$\sigma_n=1$的自旋态,求σ_x、σ_y和σ_z的可能值以及相应的概率,并且求$\boldsymbol{\sigma}$的平均值.

答案:(1) σ_n的可能值:$\sigma_n=\pm1$

$$P_+=(1+n_z)/2,\quad P_-=(1-n_z)/2;$$

(2) $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=-\boldsymbol{n}$.

16.5 求电子处于态$Y_{l0}(\vartheta,\varphi)\chi_{1/2}$时,$J^2$的可能值和相应的概率.(提示:把$Y_{l0}(\vartheta,\varphi)\chi_{1/2}$用$J^2$的本征函数展开,展开系数即为所求的概率)

答案:J^2的本征值为$j(j+1)$,$j=l\pm\frac{1}{2}$,$P_+=\frac{l+1}{2l+1}$,$P_-=\frac{1}{2l+1}$.

16.6 一个处于中心力场的粒子具有轨道角动量$L=2\hbar$和自旋角动量$S=\hbar$.自旋-轨道相互作用为$H'=A\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$($A$为常数).求相关的能级和简并度.(提示:$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=(J^2-L^2-S^2)/2$)

答案:$E=2A\hbar^2$、$-A\hbar^2$、$-3A\hbar^2$,相应的简并度为7、5、3.

16.7 假定电子处于量子态

$$\psi(\vartheta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}[\sin\vartheta\exp(\mathrm{i}\varphi)+\cos\vartheta]$$

求:(1) L_z的可能值和相应的概率;(2) L_z的平均值.

答案:(1) $\hbar$和0,相应的概率为2/3和1/3;(2) $\overline{L_z}=2\hbar/3$.

16.8 一个算符f描述两个自旋为1/2的粒子间相互作用

$$f=a+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

证明f、J^2和J_z可同时测量.其中$\boldsymbol{J}=\hbar(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)/2$.(提示:证明它们相互对易)

16.9 自旋为1/2的粒子,求:(1) $T=AS_x+BS_y$的本征值和归一化波函数;(2) 粒子处于T的本征态,求发现$S_y=\hbar/2$的概率.(提示:求T^2决定T的本征值;利用在S_z表象中$S_y=\hbar/2$的本征函数)

答案:$T_\pm=\pm\frac{1}{2}\hbar\sqrt{A^2+B^2}$.

16.10 两个电子组成的体系Hamilton量为:$H=A(S_{1z}+S_{2z})+B\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$,其中$A$和$B$为常数.求该体系的能级.

答案：三重态：$E_1=A\hbar+\frac{\hbar^2}{4}B,E_2=\frac{\hbar^2}{4}B,E_3=-A\hbar+\frac{\hbar^2}{4}B$；

单态：$E_0=-\frac{3\hbar^2}{4}B$.

16.11　具有自旋为 1/2 的粒子，放于沿 x 轴的一常磁场中. 在 $t=0$ 时，发现粒子具有 $S_x=1/2$. 求 $t>0$ 时刻发现粒子具有 $S_y=\pm1/2$ 的概率.（提示：Hamilton 为 $H=-\mu_0\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_0B\sigma_x/2$）

答案：$P_\pm=\frac{1}{2}(1\pm\sin\omega t),\omega=\frac{\mu_0B}{2\hbar}$.

16.12　三个自旋为 $\hbar/2$ 的非全同粒子组成的体系，体系的 Hamilton 量为

$$\hat{H}=E_0\left[\hat{\boldsymbol{S}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_2+\hat{\boldsymbol{S}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_3+\hat{\boldsymbol{S}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_3\right]$$

E_0 为实数，确定体系的能级和简并度.（提示：令 $\hat{\boldsymbol{S}}'=\hat{\boldsymbol{S}}_1+\hat{\boldsymbol{S}}_2$

$$\hat{\boldsymbol{S}}=\hat{\boldsymbol{S}}_1+\hat{\boldsymbol{S}}_2+\hat{\boldsymbol{S}}_3=\hat{\boldsymbol{S}}'+\hat{\boldsymbol{S}}_3.$$

$\hat{\boldsymbol{S}}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{S}}_2$ 相加：

1. 单态 $s'=0$，再与 $\hat{\boldsymbol{S}}_3$，$S^2=s(s+1)\hbar^2,s=1/2$；

2. 三重态 $s'=1$，再与 $\hat{\boldsymbol{S}}_3$，$S^2=s(s+1)\hbar^2,s=1+1/2=3/2$ 和 $s=1-1/2=1/2$. 而能级只与 s 有关）

答案：$S'^2=s'(s'+1)\hbar^2,s'=0,1;S^2=s(s+1)\hbar^2,s=1/2,3/2$

$E_s=\frac{\hbar}{2}E_0\left[s(s+1)-\frac{9}{4}\right]$；

$E_{3/2}=\frac{3\hbar}{4}E_0,s=\frac{3}{2},s'=1$，简并度 $(2s+1)=4$；

$E_{1/2}=-\frac{3\hbar}{4}E_0,s=\frac{1}{2},s'=1,0$，简并度 $(2s+1)+2=4$.

16.13　对自旋为 1 的粒子，证明在 $\hat{S}_z$ 表象中，$\hat{S}_x$、$\hat{S}_y$ 和 $\hat{S}_z$ 为

$$\hat{S}_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix};\quad \hat{S}_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix};\quad \hat{S}_z=\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$$

（提示：$\hat{S}_z$ 为对角矩阵）

第 17 章　全同粒子和多体问题

具有完全相同的内禀性质(如静止质量、电荷、自旋、磁矩等)的微观粒子称为**全同粒子**. 例如,所有的电子是全同粒子,所有的质子是全同粒子,所有的中子是全同粒子,等等. 粒子的全同性是微观粒子运动的波函数描述的必然结果. 在经典力学中,只要在初始时刻给每个电子编上号,给定了初始条件后,每个电子有确定的运动轨道. 原则上,可以根据每个电子的运动轨道,分辨出每个电子. 但在量子力学中,电子的运动用波函数描写,在波函数的交叠区域,无法区分哪个是第一个电子,哪个是第二个电子. 因此,全同粒子在量子力学中是不可区分的,这称为**全同性原理**.

17.1　全同粒子系统的交换对称性和 Pauli 不相容原理

全同粒子体系的基本特征是:任何可观察量,特别是 Hamilton 量,对于任何两个粒子交换是不变的,称为**交换对称性**. 例如 He 原子中两个电子组成的体系,Hamilton 算符为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0\,|\boldsymbol{r}_1|}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0\,|\boldsymbol{r}_2|}+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\,|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}$$

当两个电子交换位置:$\boldsymbol{r}_1\leftrightarrow\boldsymbol{r}_2$,显然 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 不变. 当人们在某处测得一个电子时,由于两个电子的内禀性质完全相同,因此不能判断它究竟是两个电子中的哪一个. 两个电子交换位置,量子态应该不变,故要求波函数对于电子交换具有一定的对称性.

现在考虑 N 个全同粒子组成的体系,其量子态用波函数描述

$$\psi=\psi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_k,\cdots,q_N)\tag{17.1.1}$$

其中 $q_i(i=1,2,\cdots,N)$表示每个粒子的全部坐标(包括空间坐标和自旋). 定义交换算符 $\hat{P}_{ik}$,其作用是:交换波函数中第 i 个粒子与第 k 个粒子的全部坐标,即

$$\hat{P}_{ik}\psi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_k,\cdots,q_N)=\psi(q_1,\cdots,q_k,\cdots,q_i,\cdots,q_N)\tag{17.1.2}$$

由全同性原理,波函数 ψ 与 $\hat{P}_{ik}\psi$ 应该描写同一个量子态,故 ψ 与 $\hat{P}_{ik}\psi$ 至多差一个常数因子 C,即 $\hat{P}_{ik}\psi=C\psi$. 再作用一次得:$\hat{P}_{ik}^2\psi=C\hat{P}_{ik}\psi=C^2\psi$,而 $\hat{P}_{ik}^2=\hat{I}$,故 $C^2=1$,即 $C=\pm1$. 因此全同粒子的波函数必须满足下列关系之一

$$\hat{P}_{ik}\psi=+\psi;\quad \hat{P}_{ik}\psi=-\psi\tag{17.1.3}$$

式中 $i\neq k(i,k=1,2,\cdots,N)$. 满足第一式的波函数称为**对称波函数**;满足第二式的波函数称为**反对称波函数**. 所以,全同粒子系统的交换对称性要求波函数是对称或反对称的.

实验表明,对于每一类粒子,它们的多粒子波函数的交换对称性是完全确定的,而且与粒子的自旋有确定的关系. 凡自旋为 $\hbar$ 的整数倍($s=0,1,2,\cdots$)的粒子,波函数对于两个粒子交换总是对称的,如光子($s=1$). 在统计方法上,它们遵循 Bose 统计,故称为 Bose 子;凡自旋为 $\hbar$ 的半奇数倍($s=1/2,3/2,\cdots$)的粒子,波函数对于两个粒子交换总是反对称的,如电子($s=1/2$). 在统计方法上,它们遵循 Fermi 统计,故称为 Fermi 子.

实验还表明,对于"复合"粒子,如果组成"复合"粒子的"基本粒子"全是 Bose 子,则"复合"粒子也是 Bose 子;如果由奇数个 Fermi 子复合而成,则"复合"粒子是 Fermi 子;如果由偶数个 Fermi 子复合而成,则"复合"粒子是 Bose 子,如 α 粒子(He 核),由 2 个质子和 2 个中子组成,故 α 粒子是 Bose 子.

下面讨论在忽略粒子相互作用的情况下,如何构造交换对称性的波函数. 如果存在相互作用,全同粒子系统的量子态可以用它们作为基矢量来展开. 首先讨论两个全同粒子组成的体系.

两个忽略相互作用的全同粒子体系的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=\hat{H}_0(q_1)+\hat{H}_0(q_2) \tag{17.1.4}$$

$\hat{H}_0(q)$表示单粒子的 Hamilton 算符. 注意:上式中两个粒子的 Hamilton 算符是完全一样的,为了表示有两个粒子存在,只能采用 q_1 和 q_2 两个坐标. 单粒子的本征方程为

$$\hat{H}_0(q)\psi_\alpha(q)=\varepsilon_\alpha\psi_\alpha(q)\quad(\alpha=1,2,\cdots) \tag{17.1.5}$$

设两个粒子中有一个处于 ψ_α 态,另一个处于 ψ_σ 态,则波函数为 $\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)$或者 $\psi_\alpha(q_2)\psi_\sigma(q_1)$,它们对应的能量都为 $\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\sigma$(这种简并称为**交换简并**),但这两个波函数不一定具有对称或反对称性质.

对于 Bose 子,要求波函数是对称的,故分两种情况

1. $\alpha=\sigma$,两个单粒子态相同,于是对称的波函数就是

$$\psi^{S}_{\alpha\alpha}(q_1,q_2)=\psi_\alpha(q_1)\psi_\alpha(q_2) \tag{17.1.6}$$

2. $\alpha\neq\sigma$,两个单粒子态不同,由 $\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)$和 $\psi_\alpha(q_2)\psi_\sigma(q_1)$可以构成对称的波函数

$$\begin{aligned}\psi^{S}_{\alpha\sigma}(q_1,q_2)&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)+\psi_\alpha(q_2)\psi_\sigma(q_1)\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+P_{12})\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)\end{aligned} \tag{17.1.7}$$

显然 $\psi^{S}_{\alpha\sigma}(q_1,q_2)$对应的能量也为 $\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\sigma$.

对于 Fermi 子,要求波函数是反对称的,由 $\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)$和 $\psi_\alpha(q_2)\psi_\sigma(q_1)$可以构成反对称波函数

$$\psi^{A}_{\alpha\sigma}(q_1,q_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)-\psi_\alpha(q_2)\psi_\sigma(q_1)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}\psi_\alpha(q_1) & \psi_\alpha(q_2)\\ \psi_\sigma(q_1) & \psi_\sigma(q_2)\end{vmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1-P_{12})\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2) \tag{17.1.8}$$

由上式可看出:若 $\alpha=\sigma$,则 $\psi^{A}_{\alpha\sigma}(q_1,q_2)=0$,故两个 Fermi 子不可能占据同一个单粒子态,这一结论称为 **Pauli 不相容原理**.

为了简单,我们首先分析两个无相互作用的自由粒子,如果要求波函数的交换对称性,对它们产生的影响. 设两个粒子都有确定的动量,分别为 $\boldsymbol{p}_\alpha$ 和 $\boldsymbol{p}_\sigma$,分三种情况讨论.

1. 不要求波函数具有交换对称性:系统的波函数为

$$\psi_{\alpha\sigma}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{(2\pi)^3}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_\alpha\cdot\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_\sigma\cdot\boldsymbol{r}_2)\right] \tag{17.1.9}$$

两个粒子的相对坐标和质心坐标为

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2;\quad \boldsymbol{R}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2) \tag{17.1.10}$$

而两个粒子的相对动量和总动量为

$$\boldsymbol{p}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_\alpha-\boldsymbol{p}_\sigma);\quad \boldsymbol{K}=\boldsymbol{p}_\alpha+\boldsymbol{p}_\sigma \tag{17.1.11}$$

上二式代入式(17.1.9)可得到

$$\psi_{\alpha\sigma}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\frac{1}{(2\pi)^3}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right]$$

$$\equiv\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}\right)\phi_{\alpha\sigma}(\boldsymbol{r}) \tag{17.1.12}$$

其中相对运动部分的波函数为

$$\phi_{\alpha\sigma}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right) \tag{17.1.13}$$

因此,在距离一个粒子半径为 $r\to r+\mathrm{d}r$ 的球壳层内,找到另一个粒子的概率为

$$\rho(r)=\int|\phi_{\alpha\sigma}(\boldsymbol{r})|^2r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{(2\pi)^3}4\pi r^2\mathrm{d}r\equiv P(r)4\pi r^2\mathrm{d}r \tag{17.1.14}$$

显然 $P(r)=1/(2\pi)^3$ 为常数.

2. 要求波函数对交换反对称:系统的波函数为

$$\psi_{\alpha\sigma}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})=\frac{1}{\sqrt{2}\,(2\pi)^3}(1-P_{12})\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_\alpha\cdot\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_\sigma\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]$$

$$= \frac{\mathrm{i}\sqrt{2}}{(2\pi)^3}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}\right)\sin\left(\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}\right)\phi_{\alpha\sigma}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}) \tag{17.1.15}$$

其中相对运动部分的波函数为

$$\phi_{\alpha\sigma}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{i}\sqrt{2}}{(2\pi)^{3/2}}\sin\left(\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}\right) \tag{17.1.16}$$

于是在距离一个粒子半径为 $r\to r+\mathrm{d}r$ 的球壳层内，找到另一个粒子的概率为

$$\begin{aligned}\rho^{\mathrm{A}}(r) &= \int |\phi_{\alpha\sigma}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r})|^2 r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega \\ &= \frac{2}{(2\pi)^3}2\pi\int_0^{\pi}\sin^2\left(\frac{pr\cos\vartheta}{\hbar}\right)\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\left[1-\frac{\sin(2pr/\hbar)}{2pr/\hbar}\right]4\pi r^2\mathrm{d}r \\ &\equiv P^{\mathrm{A}}(r)4\pi r^2\mathrm{d}r\end{aligned} \tag{17.1.17}$$

故

$$P^{\mathrm{A}}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\left[1-\frac{\sin(2pr/\hbar)}{2pr/\hbar}\right] \tag{17.1.18}$$

3. 要求波函数对交换对称：类似可得到

$$P^{\mathrm{S}}(r) = \frac{1}{(2\pi)^3}\left[1+\frac{\sin(2pr/\hbar)}{2pr/\hbar}\right] \tag{17.1.19}$$

从 $P(r)$、$P^{\mathrm{A}}(r)$和 $P^{\mathrm{S}}(r)$可看出（如图 17.1.1）：对 Fermi 子，两个粒子靠近的概率变小，好像粒子之间存在排斥作用一样；而 Bose 子则相反，好像粒子之间存在吸引作用一样. 注意：我们并没有考虑两个粒子之间的相互作用，这种“排斥”或者“吸引”作用纯粹是由于波函数的对称性引起的.

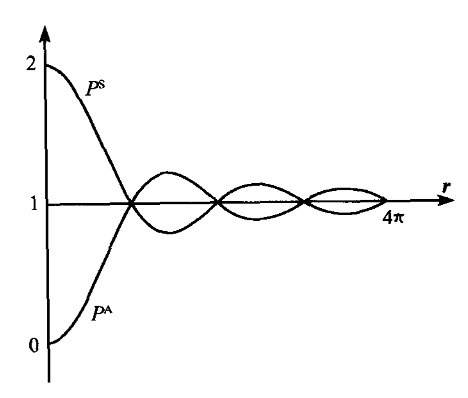


图 17.1.1　两个无相互作用自由粒子的距离分布概率

上述结果可以推广到 N 个全同粒子组成的系统. 若粒子之间的相互作用可以忽略,则系统的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \hat{H}_0(q_1) + \cdots + \hat{H}_0(q_N) = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_0(q_i) \tag{17.1.20}$$

单粒子的本征方程为

$$\hat{H}_0(q)\psi_\alpha(q) = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha(q) \quad (\alpha = 1,2,\cdots) \tag{17.1.21}$$

1. N 个 Fermi 子组成的系统

设第 1 个粒子处于 ψ_α 态,第 2 个粒子处于 ψ_σ 态,…,第 N 个粒子处于 ψ_τ 态,系统的波函数和能量分别为

$$\begin{gathered} \psi(q_1,q_2,\cdots,q_N) = \psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)\cdots\psi_\tau(q_N) \\ \varepsilon = \varepsilon_\alpha + \varepsilon_\sigma + \cdots + \varepsilon_\tau \end{gathered} \tag{17.1.22}$$

显然上式波函数不满足反对称性. 由于粒子的全同性,N 个粒子中的任意一个都可以当“第 1 个粒子”而处于 ψ_α 态,也可当“第 2 个粒子”而处于 ψ_σ 态,等等. 因此上式中任意一对粒子对调形成的波函数都具有能量 ε. 根据行列式的性质,构成 N 个 Fermi 子系统的反对称波函数

$$\psi^{\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N) = C^{\mathrm{A}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(q_1) & \psi_\alpha(q_2) & \cdots & \psi_\alpha(q_N) \\ \psi_\sigma(q_1) & \psi_\sigma(q_2) & \cdots & \psi_\sigma(q_N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_\tau(q_1) & \psi_\tau(q_2) & \cdots & \psi_\tau(q_N) \end{vmatrix} \tag{17.1.23}$$

其中 C^{A} 为归一化常数. N 个粒子有 $N!$ 种对调方式,即上式展开后有 $N!$ 项,例如:2 个粒子有 $2!=2$ 项,3 个粒子有 $3!=6$,等等. 如果单粒子波函数 ψ_α 是归一化的,为了使 $\psi^{\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 也归一化,应该取

$$C^{\mathrm{A}} = \frac{1}{\sqrt{N!}}. \tag{17.1.24}$$

$\psi^{\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 的反对称性是显然的,因为行列式的任意两列对调,行列式的值反号. 另外,如果有两个或两个以上的粒子处于同一个态,则行列式有两行或两行以上相同,行列式的值为零,即不可能有两个 Fermi 子处于同一个量子态,也满足 Pauli 不相容原理.

2. N 个 Bose 子组成的系统

对 Bose 子组成的系统,由式(17.1.22)构成交换对称的波函数如下

$$\psi^{\mathrm{S}}(q_1,q_2,\cdots,q_N) = C^{\mathrm{S}} \sum_P P\psi_\alpha(q_1)\psi_\sigma(q_2)\cdots\psi_\tau(q_N) \tag{17.1.25}$$

即把任意一对粒子对调形成的波函数相加. N 个粒子有 $N!$ 种对调方式,但 Bose 子可以有 n_α 个粒子处于单粒子态 ψ_α,处于同一个量子态的粒子对调并不产生新的波函数,一个特殊的例子是:如果所有的粒子都处于 ψ_1 态,波函数为

$$\psi(q_1,q_2,\cdots,q_N)=\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)\cdots\psi_1(q_N) \tag{17.1.26}$$

上式任意对调 $q_i \leftrightarrow q_k$ 都是不变的. 因此,式(17.1.25)中应该除去处于同一个量子态的粒子产生的对调数,共有 $N!/\prod n_\alpha!$ 项. 如果单粒子波函数 ψ_α 是归一化的,为了使 $\psi^S(q_1,q_2,\cdots,q_N)$也归一化,应该取

$$C^S=\sqrt{\frac{\prod n_\alpha!}{N!}} \tag{17.1.27}$$

自旋的影响:最后讨论一下自旋的影响,取 $q=(\boldsymbol{r},s)$,其中 $\boldsymbol{r}$ 表示空间坐标,s 是粒子的自旋. 忽略粒子自旋与轨道的相互作用,则系统的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N;s_1,s_2,\cdots,s_N)=\phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\chi(s_1,s_2,\cdots s_N) \tag{17.1.28}$$

对 Fermi 子,要求 ψ 是反对称的,故 ϕ 的对称性与 χ 相反;对 Bose 子,要求 ψ 是对称的,故 ϕ 的对称性与 χ 相同. 重要的特例是两个电子组成的系统:由 16.4 节的讨论,两个电子的自旋构成一个反对称波函数(自旋单态)和三个对称波函数(自旋三重态). 如果空间波函数是对称的,那么只有一个态;反之,如果空间波函数是反对称的,就有三个态. 我们在下节进一步讨论两个电子组成的系统,即 He 原子.

例 17.1.1　两个无相互作用的粒子,质量为 m,处于宽度为 a 的无限深势阱中. 求:(1) 系统最低的两个能级和波函数;(2) 求这两个能级的简并度. 假定这两个粒子:(a) 自旋为 1/2 的全同粒子;(b) 自旋为 1/2 的非全同粒子.

解:(1) 由例 13.1.1,单粒子波函数和能级分别为

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right);\quad E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \tag{17.1.29}$$

两个粒子分别处于 n_1 和 n_2 态时,系统的双粒子态和能量分别为

$$\psi_{n_1n_2}(x_1,x_2)=\frac{1}{2a}\sin\left(\frac{n_1\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{n_2\pi x_2}{a}\right) \tag{17.1.30}$$

$$E_{n_1n_2}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1\pi}{a}\right)^2+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_2\pi}{a}\right)^2\equiv(n_1^2+n_2^2)E_0 \tag{17.1.31}$$

最低两个能级为:$E_{11}=2E_0$;$E_{21}=E_{12}=5E_0$.

(2) (a) 对自旋为 1/2 的全同粒子,因为 $\psi_{11}(x_1,x_2)$是对称的,自旋波函数必须反对称,故取反对称的自旋单态

$$\chi_A=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+}) \tag{17.1.32}$$

总的波函数为

$$\Psi=\frac{1}{2a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)\chi_A \tag{17.1.33}$$

只有一个量子态具有能量 $E_{11}=2E_0$,故简并度为 1;$\psi_{21}(x_1,x_2)$可以构成空间对称(或者反对称)的波函数,相应的自旋波函数必须取反对称的单态(或者对称的三重态)

$$\Psi = \frac{1}{2\sqrt{2}a}\left[\sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)+\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right)\right]\chi_A \tag{17.1.34}$$

$$\Psi = \frac{1}{2\sqrt{2}a}\left[\sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)-\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right)\right]\chi_S^{1,2,3} \tag{17.1.35}$$

即有四个量子态具有能量 $E_{21}=E_{12}=5E_0$，故简并度为 4. 一般当 $n_1=n_2$ 时，简并度为 1，而当 $n_1\neq n_2$ 时，简并度为 4.

(b) 对自旋为 1/2 的非全同粒子，波函数没有对称或者反对称的要求：若 $n_1\neq n_2$，则有两个空间波函数

$$\psi_{12} = \frac{1}{2a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) \tag{17.1.36a}$$

$$\psi_{21} = \frac{1}{2a}\sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \tag{17.1.36b}$$

具有同样的能量，每个空间波函数可以乘下列四个自旋波函数之一

$$\chi_1=\chi_{1+}\chi_{2+};\quad \chi_2=\chi_{1+}\chi_{2-};\quad \chi_3=\chi_{1-}\chi_{2+};\quad \chi_4=\chi_{1-}\chi_{2-} \tag{17.1.37}$$

于是总波函数为

$$\begin{aligned}\Psi &= \frac{1}{2a}\sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)\chi_i\quad (i=1\sim 4)\\ \Psi &= \frac{1}{2a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right)\chi_i\quad (i=1\sim 4)\end{aligned} \tag{17.1.38}$$

故有 8 个量子态具有能量 $E_{21}=E_{12}=5E_0$，简并度为 8；同样讨论，当 $n_1=n_2$ 时，简并度为 4.

17.2 He 原子：仲氦和正氦，交换能

本节讨论多体问题中最简单的例子，即 He 原子. 15.3 节中用变分法求出了 He 原子的基态能量. 本节考虑 He 原子中两个电子的全同性，用微扰法讨论 He 原子，引出一个十分重要的概念，即**交换能**. 这是在经典力学中没有对应关系的概念.

忽略电子自旋-自旋和自旋-轨道相互作用(因为它们比 Coulomb 作用弱得多)，He 原子的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1 \tag{17.2.1}$$

其中无微扰部分与微扰部分分别为

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_1|}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_2|}\\ \hat{H}_1 &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\end{aligned} \tag{17.2.2}$$

上式中假定原子核不动且位于坐标原点，$\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 分别是两个电子的位置矢量. $\hat{H}_1$ 表示两个电子的相互作用. 由于 Hamilton 算符中不含自旋，故 He 原子的波函数为

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = \psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\chi(s_{1z},s_{2z}) \tag{17.2.3}$$

$\hat{H}_0$ 部分显然是两个类氢原子的 Hamilton 算符，故 $\hat{H}_0$ 的本征值为两个类氢原子能量之和，相应的本征函数是两个电子波函数的乘积. 未微扰时，设一个电子处于 ψ_α 态，具有能量 ε_α；另一个电子处于 ψ_σ 态，具有能量 ε_σ，未微扰能量为 $\varepsilon_0=\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\sigma$，相应的波函数应该为两个：$\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2)$ 和 $\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_2)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_1)$. 前者表示电子 1 在 ψ_α 态，电子 2 在 ψ_σ 态；而后者表示电子 1 在 ψ_σ，电子 2 在 ψ_α 态. 因此是交换简并的，需用简并态微扰理论. 注意：因为 Hamilton 算符中不含自旋，可以暂时把自旋部分忽略，最后再根据对称性要求，把空间部分波函数乘以自旋部分波函数. 由于电子的全同性，将零级波函数写成

$$\psi^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = C_1\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2) + C_2\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_2)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_1) \tag{17.2.4}$$

由式(15.2.7)得到

$$\begin{aligned}(H'_{11}-E^{(1)})C_1 + H'_{12}C_2 &= 0\\ H'_{21}C_1 + (H'_{22}-E^{(1)})C_2 &= 0\end{aligned} \tag{17.2.5}$$

其中

$$\begin{aligned}H'_{11} &= \iint \psi_\alpha^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma^*(\boldsymbol{r}_2)\hat{H}_1\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\ &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\iint\frac{|\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)|^2|\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2)|^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 = H'_{22}\end{aligned} \tag{17.2.6}$$

$$\begin{aligned}H'_{12} &= \iint \psi_\alpha^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma^*(\boldsymbol{r}_2)\hat{H}_1\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_2)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_1)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\ &= \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\iint\frac{\psi_\sigma^*(\boldsymbol{r}_2)\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_2)\psi_\alpha^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_1)}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 = H'_{21}\end{aligned} \tag{17.2.7}$$

久期方程为

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E^{(1)} & H'_{12}\\ H'_{21} & H'_{22}-E^{(1)}\end{vmatrix} = 0 \tag{17.2.8}$$

令：$K\equiv H'_{11}=H'_{22}$；$A\equiv H'_{12}=H'_{21}$，上式的解为 $E_\pm^{(1)}=K\pm A$. 以 $E_+^{(1)}$ 代入方程(17.2.5)，得到 $C_1=C_2$；以 $E_-^{(1)}$ 代入方程(17.2.5)，得到 $C_1=-C_2$. 故归一化零级波函数分别为

$$\begin{aligned}\psi_\mathrm{A}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2) - \psi_\alpha(\boldsymbol{r}_2)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_1)]\\ \psi_\mathrm{S}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2) + \psi_\alpha(\boldsymbol{r}_2)\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_1)]\end{aligned} \tag{17.2.9}$$

其中 $\psi_A^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$和 $\psi_S^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$分别表示反对称和对称零级波函数. 由此可见，简并微扰中重新组合零级波函数，相当于使波函数对称化. 考虑自旋后，总波函数应该为

$$\Psi_1(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = \psi_A^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\chi_S^{(\sigma)} \quad (\sigma = 1,2,3) \tag{17.2.10}$$

$$\Psi_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z}) = \psi_S^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\chi_A \tag{17.2.11}$$

其中 χ_A 和 $\chi_S^{(\sigma)}(\sigma=1,2,3)$由方程(16.4.10)和(16.4.13)决定. 因为 χ_A 是单态，故 Ψ_2 只有一个，而 $\chi_S^{(\sigma)}$ 是三重态，故 Ψ_1 有三个. 称处于单态的 He 为**仲氦**、处于三重态的 He 为**正氦**.

再看 K 和 A：积分 K 不难理解，因为$|\psi_\alpha(\boldsymbol{r}_1)|^2$ 表示电子 1 处在 ψ_α 态、在 $\boldsymbol{r}_1$ 处的概率密度；$|\psi_\sigma(\boldsymbol{r}_2)|^2$ 表示电子 2 处在 ψ_σ 态、在 $\boldsymbol{r}_2$ 处的概率密度，由 H'_{11}的表达式，K 表示两个电子的 Coulomb 相互作用能. 而积分 A 表示：电子 1 或 2 部分处在 ψ_α 态，部分处在 ψ_σ 态时的相互作用能，故 A 称为**交换能**，是由于全同性原理引起的，是电子 1 和电子 2 不可区分的必然结果.

当 He 原子处于基态时，$\psi_\alpha=\psi_{100}(\boldsymbol{r})=\psi_\sigma$，由 Pauli 不相容原理，两个电子的自旋投影必然相反，故基态零级波函数为($Z=2$)

$$\begin{aligned}\Psi_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z}) &= \psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2)\chi_A \\ &= \frac{Z^3}{\pi a_0^3}\exp\left[-\frac{Z}{a_0}(r_1+r_2)\right]\chi_A\end{aligned} \tag{17.2.12}$$

是单态且没有简并，故可用非简并微扰求能量的一级修正

$$\begin{aligned}E_0^{(1)} &= \iint \Psi_2^\dagger \hat{H}_1 \Psi_2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{8e}{\pi a_0^3}\right)^2\iint\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\exp\left[-\frac{4}{a_0}(r_1+r_2)\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 \\ &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{5e^2}{4a_0}\end{aligned} \tag{17.2.13}$$

上述积分见习题 17.10. 基态总能量为

$$E_0 \approx \varepsilon_0 + E_0^{(1)} = -2.75\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{a_0}\right) \tag{17.2.14}$$

上式与式(15.3.17)相比，显然变分法优于微扰法.

17.3 Hartree-Fock 方程和原子的壳层结构

严格来说，多电子原子不存在单粒子能级，但是在原子的光谱实验中，光谱频率依赖于单电子能级的跃迁，原子的元素周期表也表明核外电子是根据单电子能级填充的. 在 15.3 节中，我们介绍了 Hartree 自洽场方法，由变分法导出了单粒子

态的能量本征方程，即 Hartree 方程. 但这个方程没有考虑电子的全同性，不严格. 下面我们来讨论这个问题.

在单电子近似中，设第 i 个电子处于量子态 $\psi_k(q_i)$，N 个电子的系统波函数应该由式(17.1.23)表示，即

$$\psi^{\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \cdots & \psi_1(q_N)\\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \cdots & \psi_2(q_N)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \psi_N(q_1) & \psi_N(q_2) & \cdots & \psi_N(q_N)\end{vmatrix} \tag{17.3.1}$$

由 15.3 节，系统的平均能量为

$$\langle H\rangle=\int\psi^{\dagger\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\hat{H}\psi^{\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots q_N)\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2\cdots\mathrm{d}^3q_N \tag{17.3.2}$$

归一化条件为

$$\int\psi^{\dagger\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\psi^{\mathrm{A}}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2\cdots\mathrm{d}^3q_N=1 \tag{17.3.3}$$

其中 q 为电子的空间坐标与自旋坐标：$q=(\boldsymbol{r},s)$. 因此，(17.3.2)和(17.3.3)二式积分也包含对自旋部分的求和.

考虑了电子的全同性，Hartree 方程为(具体推导过程比较繁复，故忽略)

$$\begin{aligned}&\left[\hat{H}_0^{(i)}+\sum_{k=1}^{N}\int U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\right]\psi_i(\boldsymbol{r}_i)\\&\quad-\left[\sum_{k=1}^{N}\int\psi_k^*(\boldsymbol{r}_k)U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\psi_i(\boldsymbol{r}_k)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\right]\psi_k(\boldsymbol{r}_i)=\varepsilon_i\psi_i(\boldsymbol{r}_i)\end{aligned} \tag{17.3.4}$$

上式称为 **Hartree-Fock 方程**. 系统的能量为

$$\begin{aligned}E=\langle H\rangle&=\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i\\&\quad-\frac{1}{2}\sum_{k,i=1}^{N}\int|\psi_i(\boldsymbol{r}_i)|^2U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\,|\psi_k(\boldsymbol{r}_k)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\\&\quad+\frac{1}{2}\sum_{k,i=1}^{N}\int\psi_k^*(\boldsymbol{r}_k)\psi_k(\boldsymbol{r}_i)U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)\psi_i^*(\boldsymbol{r}_i)\psi_i(\boldsymbol{r}_k)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_k\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_i\end{aligned} \tag{17.3.5}$$

上式中第二个求和是对自旋平行的电子对进行求和，而式(17.3.4)中第二个求和是对自旋与 ψ_i 态电子平行的电子求和. 显然上式第二个求和是由电子全同性引起的交换能. 注意：①系统能量不是单粒子态能级的简单相加；②与 Hartree 方程(15.3.24)相比，上二式中的求和都取消了 $k\neq i$ 的限制，因为当 $k=i$ 时，相应的项

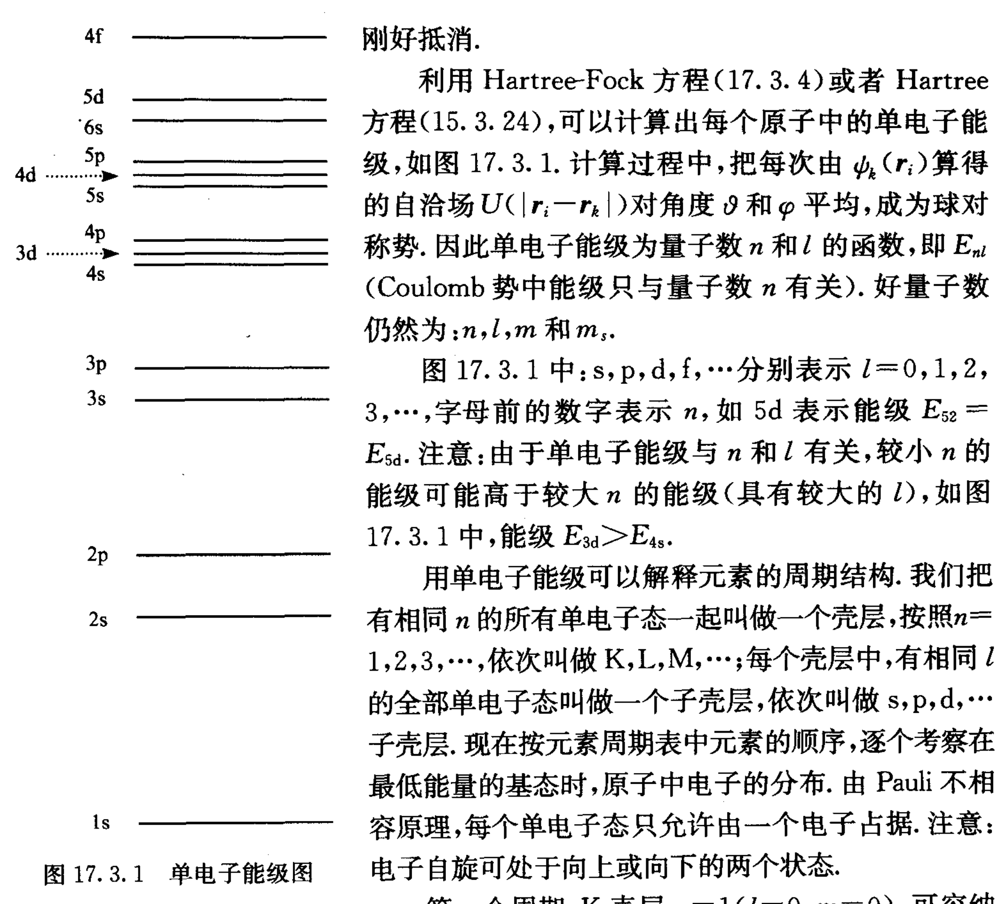


图 17.3.1 单电子能级图

刚好抵消.

利用 Hartree-Fock 方程(17.3.4)或者 Hartree 方程(15.3.24),可以计算出每个原子中的单电子能级,如图 17.3.1. 计算过程中,把每次由 $\psi_k(\boldsymbol{r}_i)$ 算得的自洽场 $U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|)$ 对角度 ϑ 和 φ 平均,成为球对称势. 因此单电子能级为量子数 n 和 l 的函数,即 E_{nl} (Coulomb 势中能级只与量子数 n 有关). 好量子数仍然为:n,l,m 和 m_s.

图 17.3.1 中:s,p,d,f,…分别表示 $l=0,1,2,3,\cdots$,字母前的数字表示 n,如 5d 表示能级 $E_{52}=E_{5d}$. 注意:由于单电子能级与 n 和 l 有关,较小 n 的能级可能高于较大 n 的能级(具有较大的 l),如图 17.3.1 中,能级 $E_{3d}>E_{4s}$.

用单电子能级可以解释元素的周期结构. 我们把有相同 n 的所有单电子态一起叫做一个壳层,按照$n=1,2,3,\cdots$,依次叫做 K,L,M,…;每个壳层中,有相同 l 的全部单电子态叫做一个子壳层,依次叫做 s,p,d,…子壳层. 现在按元素周期表中元素的顺序,逐个考察在最低能量的基态时,原子中电子的分布. 由 Pauli 不相容原理,每个单电子态只允许由一个电子占据. 注意:电子自旋可处于向上或向下的两个状态.

第一个周期:K 壳层 $n=1(l=0,m=0)$,可容纳 $2n^2=2$ 个电子. K 壳层由 H 和 He 填满;

第二个周期:K 壳层可容纳 2 个电子,L 壳层 $n=2(l=0,1;m=0,\pm1)$,可容纳 $2n^2=8$ 个电子. K 和 L 壳层由 Li 到 Ne 的 8 个元素填满. 以 Ne 为例,核外电子数为 10,基态 Ne 电子填充情况为:2 个 1s 电子,2 个 2s 电子和 6 个 2p 电子,写成:$1s^2 2s^2 2p^6$(字母前的数字表示 n,字母右上角的数字表示电子数). L 壳层有两个子壳层 s 和 p,全部填满;

第三个周期:K 和 L 壳层可容纳 10 个电子,M 壳层有 3 个子壳层,分别可填充 $2(2l+1)=2,6,10$ 个电子. K、L 壳层和 M 壳层的两个子壳层 3s 和 3p 由 Na 到 Ar 的 8 个元素填满. 以 Ar 为例,核外电子数为 18,基态 Ar 电子填充情况为:K 和 L 壳层 10 个电子;2 个 3s 电子和 6 个 3p 电子,核外电子的填充情况可写成:$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$;

第四个周期:由于 3d 能级高于 4s 能级(如图 17.3.1),元素 K 和 Ca 的核外电子先填充 4s 能级,然后才到 3d 能级;

其他周期依次类推. 注意到：每一个壳层或子壳层的结束，都是一个惰性气体元素. 事实上，不同的壳层或子壳层间具有较大的能级差(如图 17. 3. 1). 这个事实与惰性气体的化学不活泼性有直接关系. 当两个原子形成化学键结合时，它们各贡献一个电子成为自旋反平行的一对. 惰性气体原子中的电子本来已是自旋相反地成双成对，没有多余，而上一个单电子能级又相距过远. 一般来说，使一个壳层或子壳层内的电子跃迁到另一个高能级的壳层或子壳层，以求与另一个原子结合成化学键的可能性很小，所以惰性气体特别难于和其他元素形成化合物.

例 17. 3. 1　He 原子.

解：　考虑基态 He 原子，空间波函数取 $\psi_1(\boldsymbol{r})=\psi_2(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})$，故自旋波函数必定为单态

$$\chi_{\mathrm{A}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1+}\chi_{2-}-\chi_{1-}\chi_{2+}) \tag{17.3.6}$$

系统波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z})=\psi(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_2)\chi_{\mathrm{A}} \tag{17.3.7}$$

归一化条件为

$$\begin{aligned}&\int\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z})\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=\chi_{\mathrm{A}}^{\dagger}\chi_{\mathrm{A}}\int|\psi(\boldsymbol{r}_1)|^2|\psi(\boldsymbol{r}_2)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=\int|\psi(\boldsymbol{r}_1)|^2|\psi(\boldsymbol{r}_2)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2=1\end{aligned} \tag{17.3.8}$$

平均能量为

$$\begin{aligned}\langle H\rangle&=\int\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z})\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,s_{1z},s_{2z})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=\chi_{\mathrm{A}}^{\dagger}\chi_{\mathrm{A}}\int\psi^*(\boldsymbol{r}_1)\psi^*(\boldsymbol{r}_2)[\hat{H}_0+U(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)]\psi(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=\int\psi^*(\boldsymbol{r}_1)\psi^*(\boldsymbol{r}_2)\hat{H}_0\psi(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&\quad+\int|\psi(\boldsymbol{r}_1)|^2|\psi(\boldsymbol{r}_2)|^2U(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\end{aligned} \tag{17.3.9}$$

与得到方程(15. 3. 24)的过程类似，Hartree-Fock 方程为

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{e}}}\nabla^2-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}|}\right)+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}|\psi(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right]\psi(\boldsymbol{r})=\varepsilon\psi(\boldsymbol{r}) \tag{17.3.10}$$

当然，上式可从方程(17. 3. 4)直接得. 因在基态中两个电子反平行，方程(17. 3. 4)中第二个求和为零，即交换能为零.

17.4　分子的振动和转动,正氢与仲氢

对任意一个多原子分子,由于原子核的质量 M 远大于电子的质量 m_e,分子中电子的运动速度远大于原子核运动速度,故在研究分子中电子的运动时,可以忽略原子核的运动.而在研究原子核之间的相对运动(即转动和振动)时,则可以把所有核外电子看成一种"电子云",原子核沉浸在"电子云"中."电子云"的存在使原子核与原子核之间的相互作用可等效成如图 17.4.1 的作用势.

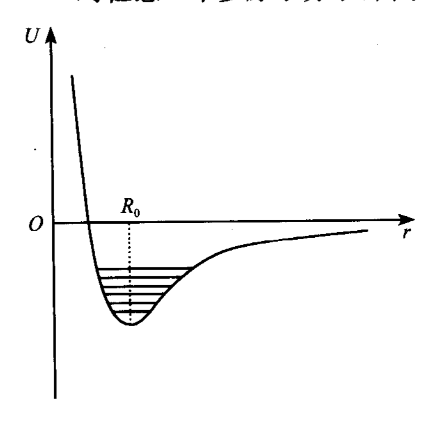


图 17.4.1　核-核之间的相互作用势

可以估计核外电子的激发能量 ε^e 远大于原子核的转动能量 ε^r 和振动能量 ε^v,即

$$\varepsilon^e : \varepsilon^r : \varepsilon^v = 1 : 10^{-2} : 10^{-4}$$

故在常温下,热运动能量 $k_B T$(见第 21 章)只能激发原子核的相对转动和振动,因而无须考虑核外电子的运动细节.

原子核的相对运动:首先考虑两个原子不同的双原子分子,它包含两个原子核和若干电子,是一个多粒子体系,严格求解非常困难.但在考虑原子核的相对运动时,可以忽略核外电子,而把核-核之间的相互作用等效成如图 17.4.1 的作用势.于是,两原子核组成的体系的 Shrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_a}\nabla_a^2-\frac{\hbar^2}{2M_b}\nabla_b^2+U(|\boldsymbol{R}_a-\boldsymbol{R}_b|)\right]\Psi(\boldsymbol{R}_a,\boldsymbol{R}_b)$$
$$=E_T\Psi(\boldsymbol{R}_a,\boldsymbol{R}_b) \tag{17.4.1}$$

其中∇_a和∇_b分别只对原子核 a 和 b 的位置矢量 $\boldsymbol{R}_a$与 $\boldsymbol{R}_b$作用.引进相对坐标和质心坐标

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}_a-\boldsymbol{R}_b;\quad \boldsymbol{R}_c=\frac{M_a\boldsymbol{R}_a+M_b\boldsymbol{R}_b}{M_a+M_b} \tag{17.4.2}$$

令 $\Psi(\boldsymbol{R}_a,\boldsymbol{R}_b)=\Psi(\boldsymbol{R})\Omega(\boldsymbol{R}_c)$,方程(17.4.1)分离变量得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_R^2+U(|\boldsymbol{R}|)\right]\Phi(\boldsymbol{R})=E\Phi(\boldsymbol{R});\quad -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_c^2\Omega(\boldsymbol{R}_c)=E_c\Omega(\boldsymbol{R}_c) \tag{17.4.3}$$

其中 $E=E_T-E_c$ 为两原子核的相对运动能量,M 和 μ 分别为总质量和折合质量

$$M=M_a+M_b,\quad \mu=\frac{M_aM_b}{M_a+M_b} \tag{17.4.4}$$

显然方程(17.4.3)第二式表示质心平动,可不考虑.而第二式与方程(13.4.2)相仿,故可把角度部分分离出来.由 13.4 节的讨论,令

$$\Phi(\boldsymbol{R}) = \frac{\chi(R)}{R} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{17.4.5}$$

其中 $l=0,1,2\cdots;m=l,l-1,\cdots,-l$. 注意：与 13.4 节不同，现在对角量子数 l 没有限制. 方程(17.4.3)第一式简化成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2} + U(R)\right]\chi(R) = E\chi(R) \tag{17.4.6}$$

上式第二项是由于分子转动带来的离心势能. 令

$$W(R) = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2} + U(R) \tag{17.4.7a}$$

当 l 不太大时，$W(R)$ 仍然存在极小点(即平衡点)R_0

$$\left.\frac{\mathrm{d}W(R)}{\mathrm{d}R}\right|_{R_0} = -\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R_0^3} + \left.\frac{\mathrm{d}U(R)}{\mathrm{d}R}\right|_{R_0} = 0 \tag{17.4.7b}$$

在平衡点 R_0 附近展开

$$W(R) = W(R_0) + \frac{1}{2}W''(R_0)(R-R_0)^2 + \cdots \tag{17.4.8}$$

令 $\mu\omega^2 = W''(R_0)$；$\xi = R - R_0$，则方程(17.4.6)化成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2\right]\chi(R) = E'\chi \tag{17.4.9}$$

其中

$$E' = E - U(R_0) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R_0^2} \tag{17.4.10}$$

显然方程(17.4.9)与谐振子的方程(13.3.2a)类似. 不同的是，对方程(13.3.2a)，变量 x 的变化范围是$(-\infty,\infty)$，而方程(17.4.9)中，变量 ξ 的范围为$(-R_0,\infty)$. 方程(17.4.9)在$(-R_0,\infty)$存在有界的解为

$$\chi(\xi) \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2\xi^2\right)H_\nu(\alpha\xi) \tag{17.4.11}$$

其中 $\alpha = \sqrt{\mu\omega/\hbar}$，$H_\nu(\alpha\xi)$是 Hermite 函数(注意：不是多项式)

$$H_\nu(\xi) = \frac{1}{2\Gamma(-\nu)}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!}\Gamma\left(\frac{k-\nu}{2}\right)(2\xi)^k \tag{17.4.12}$$

ν 由边界($\xi=-R_0$)决定：$H_\nu(-\alpha R_0)=0$. 一般，ν 不是正整数(注意：与谐振子解的区别)，但如果 l 不太大(即角动量不太大)，αR_0 很小时，ν 接近正整数. 方程(17.4.9)的能量本征值为

$$E' = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{17.4.13}$$

由式(17.4.10)得到双原子分子的相对运动能量为

$$E = U(R_0) + \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I} \tag{17.4.14}$$

其中 $I=\mu R_0^2$ 为双原子分子的转动惯量. 上式第一项为常数,第二、三项分别表示双原子分子的振动和转动能量.

以上我们简单介绍了两个原子不同的双原子分子的振动和转动. 现在考虑两个原子相同的双原子分子,如 H_2 分子. H_2 分子的两个 H 原子核(质子)是全同粒子,故处理两个核之间的振动和转动状态时,必须考虑 H 原子核的全同性. 质子是自旋为 1/2 的 Fermi 子,当两个质子交换时,即 $\boldsymbol{R}_a \leftrightarrow \boldsymbol{R}_b$,由式(17.4.2),质子的质心位置不变,而相对位置 $\boldsymbol{R} \to -\boldsymbol{R}$. 在球坐标中,矢量反向的变换为

$$R \to R; \quad \vartheta \to \pi - \vartheta; \quad \varphi \to \pi + \varphi \tag{17.4.15}$$

故当两个质子交换时,式(17.4.5)中径向部分不变(振动部分的波函数),球谐函数(转动部分的波函数)的变换为

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \to Y_{lm}(\pi-\vartheta,\pi+\varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{17.4.16}$$

即对 l 是偶数,球谐函数不变;而对 l 是奇数,球谐函数变号. 质子是 Fermi 子,要求波函数是反对称的,因此 H_2 分子中表示核运动部分的波函数应该为

$$\Phi_1(\boldsymbol{R}) = \frac{\chi(R)}{R} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\chi_A \quad (l\text{ 是偶数}) \tag{17.4.17}$$

$$\Phi_2(\boldsymbol{R}) = \frac{\chi(R)}{R} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\chi_S^\sigma \quad (l\text{ 是奇数}) \tag{17.4.18}$$

式中 χ_A 是自旋单态,而 χ_S^σ 是自旋三态. 处在自旋单态($S=0$)的氢分子称为**仲氢**,而处在自旋三重态($S=1$)的氢分子称为**正氢**. 自然界中,正氢与仲氢分子数比为 3∶1,因此正氢发出的光谱线较强. 这充分说明了全同粒子的对称性是可观察的. 由于氢分子由正氢与仲氢组成,故 H_2 的统计特性(特别是低温下)与不同原子核组成的双原子分子有很大不同,将在第 21 章讨论.

核外电子的运动:下面考虑氢分子核外电子的运动,计算 H_2 分子处于基态时的能量. 在考虑核外电子的运动时,假定两个核不动,把核-核之间的距离作为参数而不是动力学变量来看待. H_2 分子的 Hamilton 函数由八项组成

$$\begin{aligned}\hat{H} =& -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_2^2 \\ & - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}_{a1}|} + \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{b2}|} + \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{a2}|} + \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{b1}|} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{12}|} - \frac{1}{R_{ab}}\right)\end{aligned} \tag{17.4.19}$$

其中 a 和 b 表示两个原子核,两个电子用 1 和 2 表示,$\boldsymbol{r}_{\alpha\sigma}$($\alpha$=a,b;$\sigma$=1,2)表示第 α 个核到第 σ 个电子的位置矢量,$\boldsymbol{r}_{12}$ 表示电子 1 到电子 2 的位置矢量,R_{ab} 表示核 a 到核 b 之间的距离. 上式前两项表示两个电子的动能,第 3~6 项分别表示核 a 或 b 与第一(或第二)个电子的 Coulomb 作用能;第 7、8 项分别表示电子-电子之间、核-核之间的 Coulomb 作用能,最后一项为常量. 核 a 与电子 1 组成的"氢原子"基

态波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_{a1}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}_{a1}|}{a_0}\right) \tag{17.4.20}$$

核 b 与电子 2 组成的“氢原子”基态波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_{b2}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}_{b2}|}{a_0}\right) \tag{17.4.21}$$

核 a 与电子 2、核 b 与电子 1，以及电子-电子之间的 Coulomb 作用当作微扰. 由于电子的全同性，氢分子的零级近似波函数取为

$$\begin{aligned} \Psi_+ &= C_+\ [\psi(\boldsymbol{r}_{a1})\psi(\boldsymbol{r}_{b2}) + \psi(\boldsymbol{r}_{a2})\psi(\boldsymbol{r}_{b1})]\chi_A \\ \Psi_- &= C_-\ [\psi(\boldsymbol{r}_{a1})\psi(\boldsymbol{r}_{b2}) - \psi(\boldsymbol{r}_{a2})\psi(\boldsymbol{r}_{b1})]\chi_S^\sigma \end{aligned} \tag{17.4.22}$$

其中 C_+ 和 C_- 为归一化常数，

$$C_\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1\pm\Delta^2)}};\quad \Delta = \int \psi(\boldsymbol{r}_{a1})\psi(\boldsymbol{r}_{b1})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \tag{17.4.23}$$

上式中 $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1$ 表示对电子 1 的空间坐标进行积分. 显然 Ψ_+ 是单态，而 Ψ_- 是三重态. 由非简并微扰公式(15.1.15)得到氢分子的基态能量为

$$E_\pm = 2E_H + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R_{ab}} + \frac{K+J}{1\pm\Delta^2} \tag{17.4.24}$$

其中 E_H 是氢原子基态能量，由式(13.4.28)给出($n=1, Z=1$)，两个电子的 Coulomb 相互作用能 K 和交换能 J 分别为

$$K = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\iint |\psi(\boldsymbol{r}_{a1})|^2 |\psi(\boldsymbol{r}_{b2})|^2 \left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}_{12}|} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{a2}|} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{b1}|}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2$$

$$J = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\iint \psi(\boldsymbol{r}_{a1})\psi(\boldsymbol{r}_{b2})\psi(\boldsymbol{r}_{b1})\psi(\boldsymbol{r}_{a2}) \left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}_{12}|} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{a2}|} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}_{b1}|}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2$$

从方程(17.4.24)可以计算出 $E_\pm$ 随核—核之间距离 R_{ab} 的变化关系，如图 17.4.2，可见 E_- 随 R_{ab} 单调下降，对应于原子间相互排斥，不可能形成稳定的 H_2 分子. 而 E_+ 存在极小值，即可以形成稳定的 H_2 分子. 事实上，单态的空间波函数是交换对称的，两个电子靠近的概率大(即处于两个原子核之间的概率大)，借助于它们对两个原子核的吸引力，可以形成稳定的束缚态，而三重态则反之(见 17.1 节的讨论). 值得说明的是：交换能对极小值的形成是非常重要的，如果忽略交换能，形成的极小很浅，不足以构成稳定的分子. 理论计算的平衡距离为 $R_0 \approx 0.077\text{nm}$，与实验值 0.074nm

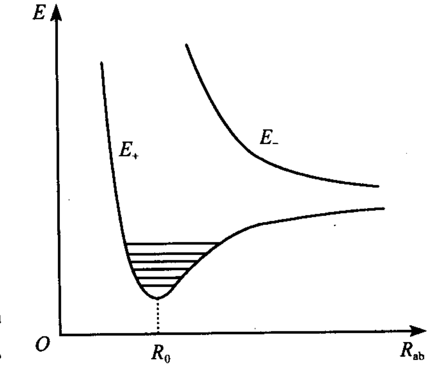


图 17.4.2　结全能随核-核之间距离的变化

近似一致.

例 17.4.1 氢分子离子 H_2^+ 的结合能.

解: 氢分子离子 H_2^+ 中一个核外电子在两个全同质子的 Coulomb 场中运动. 根据本节开头的讨论,在讨论核外电子的运动时,可以把两个原子核之间的距离作为动力学参数,氢分子离子 H_2^+ 系统的 Hamilton 函数为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}_a|}+\frac{1}{|\boldsymbol{r}_b|}-\frac{1}{R_{ab}}\right)\equiv\hat{H}_e+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R_{ab}} \tag{17.4.25}$$

其中 $|\boldsymbol{r}_a|$ 和 $|\boldsymbol{r}_b|$ 分别表示核外电子到两个核的距离. 采用变分法求基态能量,首先考虑试探函数:因为电子与每一个核组成类氢原子,相应的波函数为

$$\psi_a(\boldsymbol{r}_a)=\sqrt{\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}\exp\left(-Z\frac{|\boldsymbol{r}_a|}{a_0}\right)$$

$$\psi_b(\boldsymbol{r}_b)=\sqrt{\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}\exp\left(-Z\frac{|\boldsymbol{r}_b|}{a_0}\right)$$

对氢原子 $Z=1$,但另一个原子核的存在,使 Z 略大于 1. 因此我们把 Z 作为变分参数. 考虑到两个原子核的全同性,取试探函数为

$$\psi_\pm=C_\pm\left[\psi_a(\boldsymbol{r}_a)\pm\psi_b(\boldsymbol{r}_b)\right] \tag{17.4.26}$$

注意:①上式交换 $\boldsymbol{r}_a\leftrightarrow\boldsymbol{r}_b$ 是对称(+)和反对称的(−),因为 ψ_a 和 ψ_b 的函数形式相同;②Hamilton 函数与自旋无关,可先只考虑空间部分,然后乘自旋波函数. 式(17.4.26)中系数 $C_\pm$ 由归一化条件决定

$$C_\pm=\frac{1}{\sqrt{2(1\pm\Delta)}};\quad \Delta=\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\int\exp\left[-\frac{Z}{a_0}(|\boldsymbol{r}_a|+|\boldsymbol{r}_b|)\right]d^3\boldsymbol{r} \tag{17.4.27}$$

由试探函数式(17.4.26)得到电子的平均能量为

$$\begin{aligned}E_\pm&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{R_{ab}}+(\psi_\pm,\hat{H}_e\psi_\pm)\\&=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{R_{ab}}+\frac{\langle\psi_a|\hat{H}_e|\psi_a\rangle\pm\langle\psi_b|\hat{H}_e|\psi_a\rangle}{1\pm\Delta}\end{aligned} \tag{17.4.28}$$

(17.4.28)的推导,已利用了对称关系

$$\langle\psi_a|\hat{H}_e|\psi_a\rangle=\langle\psi_b|\hat{H}_e|\psi_b\rangle,\quad \langle\psi_a|\hat{H}_e|\psi_b\rangle=\langle\psi_b|\hat{H}_e|\psi_a\rangle \tag{17.4.29}$$

经过复杂的积分计算,从式(17.4.28)可得到 $E_\pm=E_\pm(Z)$ 的函数关系,然后由

$$\frac{\partial E_\pm(Z)}{\partial Z}=0 \tag{17.4.30}$$

可定出变分参数 Z,再代入式(17.4.28)得到 $E_\pm=E_\pm(R_{ab})$. 变化关系 $E_\pm\sim R_{ab}$ 与

图 17.4.2 类似，讨论也类似.

习　题　17

17.1　一维无限深势阱中含有三个电子. 电子之间的 Coulomb 作用可忽略. 每个电子的平均能量为 $E=12.4\text{eV}$. 当势阱中有 4 个电子时，每个电子的平均能量为多少？

答案：15.5eV.

17.2　两个质量为 m、自旋为 1/2 的全同粒子处于一维无限深势阱中. 粒子之间存在可作为微扰的相互作用势 $V(|x_1-x_2|)$.（1）用单粒子态和自旋态给出三个最低能态；(2) 求三个最低能态的一级修正.（提示：Hamilton 量与自旋波函数无关，可用非简并态微扰方法处理简并态）

答案：(1) 基态：$n=m=1$，自旋单态；第一激发态：$n=1,m=2$，一个单态，三个三重态，四度简并；第二激发态：$n=m=2$，单态.

17.3　两个在有心力势阱中的电子，阱中存在三个单粒子态. 写出这两个电子系统所有可能的波函数.

17.4　质量为 m 的两个全同 Bose 子在一维谐振子势中运动，$U=m\omega^2x^2/2$，相互作用为 $U_1=\alpha\exp[-\beta(x_1-x_2)^2]$$(\beta>0)$. 求基态能量.

答案：$\Delta E=\dfrac{\alpha_0\alpha}{\sqrt{\alpha_0^2+2\beta}}$，　$\alpha_0=\sqrt{m\omega/\hbar}$.

17.5　两个质量为 m 的粒子束缚于一维谐振子势 $U=kx^2/2$ 中，两粒子间还存在简谐吸引力 $F_{12}=-K(x_1-x_2)$.（1）求系统的最低三个能级；(2) 若粒子为无自旋的 Bose 子，最低三个能级的量子态中哪些是可能的？(3) 若粒子为自旋 1/2 的 Fermi 子，最低三个能级的量子态中哪些是可能的？（提示：令变换

$$\xi=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2);\quad \eta=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2))$$

答案：$|nm\rangle=\psi_n^k(\xi)\psi_m^{(k+2K)}(\eta)$：$E_{00}=\dfrac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)$；

$$E_{10}=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)+\hbar\omega_1,\quad E_{01}=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)+\hbar\omega_2;$$

其中 $\omega_1=\sqrt{k/m}$，　$\omega_2=\sqrt{(k+K)/m}$.

17.6　两个无相互作用粒子处于某势阱中，势阱中单粒子能态为 $\psi_a(x)$、$\psi_b(x)$、$\psi_c(x)$，…，相应的能级为 $E_a<E_b<E_c<\cdots$. 求两个粒子体系的两个最低能级、相应的简并度和相应的波函数，假定：(1) 两个自旋为 1/2 的可区分粒子；(2) 两个自旋为 1/2 的不可区分粒子；(3) 两个自旋为 0 的可区分粒子.

答案:(1) E_a+E_a,简并度:4;E_a+E_b,简并度:8;(2) E_a+E_a,简并度:1;E_a+E_b,简并度:4;(3) E_a+E_a,简并度:1;E_a+E_b,简并度:1.

17.7　两个质量为 m 的粒子处于一个长方体 $a>b>c$ 内,粒子间的相互作用势为 $U(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)=A\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$. 用一级微扰法求体系的基态能量,如果:(1) 粒子不全同;(2) 零自旋的全同粒子;(3) 自旋为 1/2 且平行的全同粒子.

答案:(1) $\Delta E'=\dfrac{27}{8abc}$;(2) 同(1);(3)$\Delta E'=0$.

17.8　一维谐振子势阱中有 $N(N\gg1)$个全同 Fermi 子,两两之间的作用势为 δ 函数,即

$$U(x_1,x_2,\cdots x_N)=\frac{1}{2}k\sum_{i=1}^{N}x_i^2+\frac{1}{2}\lambda\sum_{i\neq j}^{N}\delta(x_i-x_j),\quad k,\lambda>0$$

用归一化的谐振子单粒子波函数 $\psi_n(x)$表示两个最低能量态的归一化波函数和相应的能量.(提示:把 δ 函数作用势作为微扰,由于波函数的反对称性,微扰矩阵元为零,故对零级波函数没有影响)

答案:$E_{n_1,n_2,\cdots,N}=\dfrac{\hbar\omega}{2}\left(\dfrac{N}{2}+\sum\limits_{i=1}^{N}n_i\right)$: $E_{0,1,\cdots,N-1}=\dfrac{1}{2}\hbar\omega N^2$;

$$E_{0,1,\cdots,N-2,N}=\frac{1}{2}\hbar\omega(N^2+2).$$

17.9　对氢分子:(1) 忽略两个电子与同一氢原子核的作用,利用氢原子基态波函数(包括电子自旋)写出氢分子的零级波函数. ;(2) 分子中原子核之间的距离处于正常值时,说明两个电子处于什么态?(提示:自旋包括单态和三态)

答案:(2) 自旋单态.

17.10　求积分

$$\iint\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\exp\left[-\frac{4}{a_0}(r_1+r_2)\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2$$

提示:利用球谐函数的母函数展开

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=\frac{1}{r_1}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\Theta)\quad(r_1>r_2)$$

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=\frac{1}{r_2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\Theta)\quad(r_2>r_1)$$

以及加法公式

$$P_l(\cos\Theta)=P_l(\cos\vartheta_1)P_l(\cos\vartheta_2)+2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)}P_l^{|m|}(\cos\vartheta_1)P_l^{|m|}(\cos\vartheta_2)\cos m(\varphi_1-\varphi_2)$$

式中 Θ 是 $\boldsymbol{r}_1$ 与 $\boldsymbol{r}_2$ 之间的夹角.

第 18 章　微观粒子的散射

散射的目的是探测宏观材料或微观物质(复合粒子)的内部结构. 著名的例子是 Rutherford 的 α 粒子散射实验, α 粒子经原子散射后存在大角度偏转,肯定了原子的核状结构,揭开了人类研究原子结构的新领域. 在前面各章中我们主要考虑 Schrödinger 方程的束缚态解,能量本征值是分立的、量子化的. 而在散射问题中,入射波和散射波都扩展到无穷远处,故是 Schrödinger 方程的非束缚态解,能量可以连续变化. 此时我们感兴趣的是粒子被散射后,散射到各个方向的概率. 在量子力学中,如果在散射过程中散射和被散射粒子只有动能交换,粒子内部的状态没有变化(如内部电子被激发或电离等),则这种散射称为**弹性散射**;反之,称为**非弹性散射**,我们主要考虑弹性散射.

18.1　散射的描述方法:微分散射截面和散射振幅

首先介绍两个基本概念.

微分散射截面:设一束粒子流由 $z=-\infty$ 向粒子 A 射来,A 称为**散射中心**,为了方便,假定 A 的质量远大于入射粒子的质量,由碰撞而引起 A 的运动可忽略(当然散射过程是一个二体问题,可严格求解). 如图 18.1.1,由于 A 的散射,入射粒子流发生 ϑ 角(入射方向与散射方向的夹角)的偏转, ϑ 称为**散射角**. 显然,在单位时间内,散射到极角 ϑ、方位角 φ 处立体角 $\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}S/r^2$ 的粒子数 $\mathrm{d}N$ 与入射粒子流强度 N(单位时间内穿过垂直于入射粒子流方向的单位面积的粒子数)和 $\mathrm{d}\Omega$ 成正比,即

$$\mathrm{d}N=\sigma(\vartheta,\varphi)N\mathrm{d}\Omega \tag{18.1.1}$$

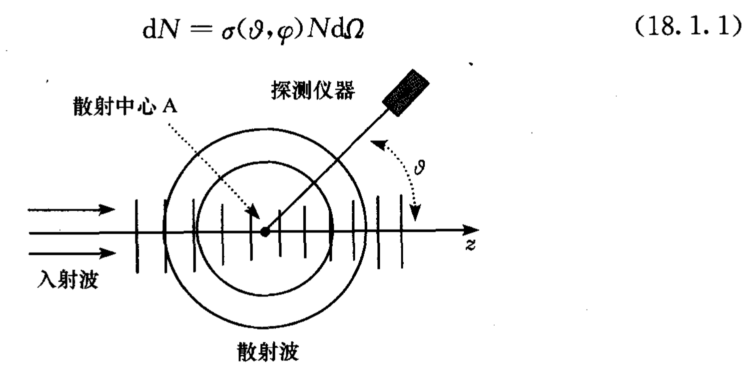


图 18.1.1　粒子的散射

比例系数 $\sigma(\vartheta,\varphi)$称为**微分散射截面**,它具有面积的量纲. 散射理论的核心问题就是如何求微分散射截面 $\sigma(\vartheta,\varphi)$.

散射振幅:设入射粒子由 z 方向的平面波 $\psi_i=\psi_0\exp(ikz)$表示,具有固定的动量 $p_z=k\hbar$,属于动量本征态. 入射粒子经 A 散射后,波函数由两部分构成,即入射波与散射波之和:$\psi=\psi_i+\psi_s$. 显然,散射波是由散射中心向外发散的波,在距散射中心足够远处(实验测量一般在距离散射中心 A 较远处),被散射粒子脱离了散射中心 A 的作用,散射波应该是球面波,即具有形式(证明见 18.3 节)

$$\psi_s(r\to\infty)=\psi_0\frac{f(\vartheta,\varphi)}{r}\exp(ikr) \tag{18.1.2}$$

注意:在弹性散射中,$\boldsymbol{k}$ 的大小不变,仅方向变化. $f(\vartheta,\varphi)$称为**散射振幅**,具有长度的量纲.

下面求散射振幅 $f(\vartheta,\varphi)$与微分散射截面 $\sigma(\vartheta,\varphi)$的关系. 入射粒子和散射粒子的概率流密度分别为

$$J_i=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_i\frac{\partial\psi_i^*}{\partial z}-\psi_i^*\frac{\partial\psi_i}{\partial z}\right)=\frac{\hbar k}{m}|\psi_0|^2\equiv N \tag{18.1.3}$$

$$J_r=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi_s\frac{\partial\psi_s^*}{\partial r}-\psi_s^*\frac{\partial\psi_s}{\partial r}\right)=\frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\vartheta,\varphi)|^2}{r^2}|\psi_0|^2 \tag{18.1.4}$$

J_r 表示单位时间内穿过球面上单位面积的粒子数,故散射到极角 ϑ、方位角 φ 处立体角 $d\Omega=dS/r^2$ 的粒子数 dN 为

$$\begin{aligned}dN&=J_r dS=\frac{\hbar k}{m}|\psi_0|^2|f(\vartheta,\varphi)|^2\frac{dS}{r^2}\\&=J_i|f(\vartheta,\varphi)|^2d\Omega=N|f(\vartheta,\varphi)|^2d\Omega\end{aligned} \tag{18.1.5}$$

上式与式(18.1.1)比较,显然有

$$\sigma(\vartheta,\varphi)=|f(\vartheta,\varphi)|^2 \tag{18.1.6}$$

由上式,得到了散射振幅 $f(\vartheta,\varphi)$就求得了微分散射截面 $\sigma(\vartheta,\varphi)$. 而散射振幅 $f(\vartheta,\varphi)$由波函数 ψ_s 的渐近特性式(18.1.2)给出. 因此归根结底是求解散射粒子波函数满足的 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+U(\boldsymbol{r})\psi=E\psi \tag{18.1.7}$$

其中 $U(\boldsymbol{r})$为入射粒子与散射中心 A 的相互作用势,$E=k^2\hbar^2/2m$ 为入射粒子的能量. 不同的是,我们只要求方程(18.1.7)的渐近解就可以了,而不用求整个空间的解.

必须说明的是,上述理论分析中实质上作了三个近似:①一般散射中心 A 不可能是单一的,实验中散射靶往往含有许多散射中心,如果每个散射中心的距离足够大,可以忽略由不同散射中心产生的散射波的干涉效应;②散射靶一般很薄,入射粒子经一次散射后就离开散射靶,完全可以忽略波的多重散射;③入射粒子流不

是太强，忽略粒子之间的相互作用. 但另一方面，散射截面是一个统计的概念，为得到较好的统计性，要求入射粒子流又不能太弱.

18.2　分波法：低能粒子的散射

假定入射粒子与散射中心 A 的相互作用势为有心力势 $U(\boldsymbol{r})=U(r)$，下面介绍所谓**分波法**求微分散射截面 $\sigma(\vartheta,\varphi)$. 假定入射粒子的波函数关于 z 轴对称，与 φ 无关，即 $\sigma(\vartheta,\varphi)=\sigma(\vartheta)$. 首先把入射平面波用球面波展开

$$\psi_0\exp(\mathrm{i}kz)=\psi_0\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\vartheta) \tag{18.2.1}$$

其中 $j_l(kr)$是球 Bessel 函数，它的渐近关系为

$$j_l(kr)\approx\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\quad(r\to\infty) \tag{18.2.2}$$

每个球面波称为**分波**. 另一方面，在有心力场 $U(r)$且关于 z 轴对称的条件下，方程(18.1.7)的解可展开为

$$\psi(r,\vartheta)=\sum_{l,m}^{\infty}R_l(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\sum_{l=0}^{\infty}R_l(r)P_l(\cos\vartheta) \tag{18.2.3}$$

上式相当于取量子数 $m=0$. $R_l(r)$满足径向 Schrödinger 方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}\right)+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R_l=0 \tag{18.2.4}$$

当 $r\to\infty$时，$U(r)\to0$，令 $u_l(r)=rR_l(r)$，上式简化成

$$\frac{\mathrm{d}^2u_l}{\mathrm{d}r^2}+k^2u_l=0 \tag{18.2.5}$$

其中 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. 上式的通解为：$u_l(r)=A_l'\sin(kr+\delta_l')$. 因此有

$$R_l(r)\approx\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\frac{u_l(r)}{r}=\psi_0\frac{A_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{18.2.6}$$

上式为了方便，引进了两个新的常数 A_l 和 δ_l. 代入式(18.2.3)得到

$$\psi(r,\vartheta)\approx\psi_0\sum_{l=0}^{\infty}\frac{A_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)P_l(\cos\vartheta)\quad(r\to\infty) \tag{18.2.7}$$

与式(18.1.2)比较，当 $r\to\infty$时，应该有

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{\infty}\frac{A_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)P_l(\cos\vartheta)\\&=\left[\exp(\mathrm{i}kz)+\frac{f(\vartheta)}{r}\exp(\mathrm{i}kr)\right]\end{aligned} \tag{18.2.8}$$

又由展开式(18.2.1)和(18.2.2)得到

$$\sum_{l=0}^{\infty}\frac{A_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)P_l(\cos\vartheta)$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)\mathrm{i}^l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)P_l(\cos\vartheta)+\frac{f(\vartheta)}{r}\exp(\mathrm{i}kr) \qquad (18.2.9)$$

把三角函数写成指数形式得到

$$\left[2\mathrm{i}kf(\vartheta)+\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\pi/2}P_l(\cos\vartheta)-\sum_{l=0}^{\infty}A_l\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_l-l\pi/2)}P_l(\cos\vartheta)\right]\exp(\mathrm{i}kr)$$

$$-\left[\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\pi/2}P_l(\cos\vartheta)-\sum_{l=0}^{\infty}A_l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta_l-l\pi/2)}P_l(\cos\vartheta)\right]\exp(-\mathrm{i}kr)=0$$

恒成立的条件是

$$2\mathrm{i}kf(\vartheta)+\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\pi/2}P_l(\cos\vartheta)=\sum_{l=0}^{\infty}A_l\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_l-l\pi/2)}P_l(\cos\vartheta)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\pi/2}P_l(\cos\vartheta)=\sum_{l=0}^{\infty}A_l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\delta_l-l\pi/2)}P_l(\cos\vartheta) \qquad (18.2.10)$$

由 $P_l(\cos\vartheta)$的正交性，从第二个方程可得

$$A_l=(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \qquad (18.2.11)$$

代入方程(18.2.10)第一式得到

$$2\mathrm{i}kf(\vartheta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\vartheta)2\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l \qquad (18.2.12)$$

故散射振幅和微分截面分别为

$$f(\vartheta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\vartheta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l \qquad (18.2.13)$$

$$\sigma(\vartheta)=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\vartheta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l\right|^2 \qquad (18.2.14)$$

将式(18.2.2)与式(18.2.6)比较可知：将入射波用球面波展开后，散射后的波函数相当于每个分波有一个确定的相移 δ_l，只要求得了每个分波的相移 δ_l，也就求得了微分截面. 对相移 δ_l 的正负判断为：如果 $U(r)=0$，则 $\delta_l=0$；如果 $U(r)>0$，表示入射粒子与散射中心之间的力为斥力，粒子被推向外，径向波函数将向外移，于是 $\delta_l<0$；反之，如果 $U(r)<0$，说明入射粒子与散射中心之间的力为吸力，粒子被吸引，径向波函数将向内移，于是 $\delta_l>0$.

必须说明，用分波法得到的微分截面式(18.2.14)是严格的，但在实际计算中不可能求出无限多个分波，故要求级数收敛较快，只需要求几个分波. 设散射势的有效半径为 a，当入射粒子的角动量 $L>pa$（p 为入射粒子的动量）时，粒子的轨道在散射势的有效半径之外，散射可忽略. 故可以把 $L>pa$ 作为估计条件：因 $p=\hbar k$ 和 $L^2=l(l+1)\hbar^2\approx(l\hbar)^2$，即当 $l>ka$ 时，散射作用可忽略. 于是式(18.2.14)只要求和至 $l\leqslant ka$ 项就可以了. 故分波法对低能粒子散射计算比较有效.

例 18.2.1　球对称势阱的散射.

解：　设散射中心的势场为常势阱，即

$$U(r)=\begin{cases}-U_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases}\tag{18.2.15}$$

假定入射粒子的能量很低，满足 $ka\ll 1$，于是式(18.2.14)中求和只要保留第一项 $l=0$就可以了. 令 $u_0(r)=rR_0(r)$，代入方程(18.2.4)(注意：$l=0$)得到

$$\frac{\mathrm{d}^2u_0}{\mathrm{d}r^2}+k^2u_0=0,\quad r\leqslant a;\quad \frac{\mathrm{d}^2u_0}{\mathrm{d}r^2}+k'^2u_0=0,\quad r>a\tag{18.2.16}$$

其中

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},\quad k'^2=k^2+\frac{2mU_0}{\hbar^2}\equiv k^2+k_0^2\tag{18.2.17}$$

方程(18.2.16)的通解为

$$\begin{aligned}u_0(r)&=A'\sin(k'r+\delta_0'),\quad r\leqslant a\\ u_0(r)&=A\sin(kr+\delta_0),\quad r>a\end{aligned}\tag{18.2.18}$$

由 $R_0(r)=u_0(r)/r$ 在 $r=0$ 处有限条件得到 $\delta_0'=0$；在 $r=a$ 处波函数和一阶导数连续

$$R_0(r)\,|_{a-0}=R_0(r)\,|_{a+0};\quad \left.\frac{\mathrm{d}R_0(r)}{\mathrm{d}r}\right|_{r=a-0}=\left.\frac{\mathrm{d}R_0(r)}{\mathrm{d}r}\right|_{r=a+0}\tag{18.2.19}$$

得到

$$\begin{aligned}A'\sin(k'a)&=A\sin(ka+\delta_0)\\ A'k'\cos(k'a)&=Ak\cos(ka+\delta_0)\end{aligned}\tag{18.2.20}$$

上二式相除得到：$k'\cot(k'a)=k\cot(ka+\delta_0)$，即

$$\delta_0=\arctan\left[\frac{k}{k'}\tan(k'a)\right]-ka\tag{18.2.21}$$

当 $k\to 0$，利用展开 $\arctan(x)\approx x$，上式简化为

$$\delta_0=\frac{k}{k'}\tan(k'a)-ka\approx ka\left[\frac{\tan(k_0a)}{k_0a}-1\right]\ll 1\tag{18.2.22}$$

故由式(18.2.14)得到

$$\sigma(\vartheta)=\frac{1}{k^2}\,|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0\,|^2\approx\frac{1}{k^2}\delta_0^2=a^2\left[\frac{\tan(k_0a)}{k_0a}-1\right]^2\tag{18.2.23}$$

18.3　Born 近似：高能粒子的散射

把 Schrödinger 方程(18.1.7)改写成形式

$$(\boldsymbol{\nabla}^2+k^2)\psi=\frac{2m}{\hbar^2}U(\boldsymbol{r})\psi.\tag{18.3.1}$$

其中 $k^2=2mE/\hbar^2$ 为入射粒子的波数. 定义 Green 函数

$$(\boldsymbol{\nabla}^2+k^2)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\delta(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \tag{18.3.2}$$

则方程(18.3.1)可化成积分方程

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_0(\boldsymbol{r}) - \frac{2m}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{18.3.3}$$

把上式代入方程(18.3.1)并利用(18.3.2)可直接证明. 其中 $\psi_0(\boldsymbol{r})$是齐次方程

$$(\boldsymbol{\nabla}^2+k^2)\psi_0 = 0 \tag{18.3.4}$$

的通解. 对散射问题,取 $\psi_0(\boldsymbol{r})$为入射波:$\psi_0(\boldsymbol{r})=\psi_i(\boldsymbol{r})=\psi_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$. 于是方程(18.3.3)可写成

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r}) &= \psi_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) - \frac{2m}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3 r' \\ &= \psi_\mathrm{i}(\boldsymbol{r})+\psi_\mathrm{s}(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{18.3.5}$$

称为 **Lippman-Schwinger 积分方程**. 可以证明方程(18.3.2)的解,即 Green 函数为

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\exp(\mathrm{i}k\,|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|) \tag{18.3.6}$$

事实上,式(18.3.2)可用 Fourier 积分法求之,设

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \int g(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{r}')\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{18.3.7}$$

代入式(18.3.2)可得

$$g(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}')}{k'^2-k^2} \tag{18.3.8}$$

其中利用

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\exp\left[\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{18.3.9}$$

因此

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{\exp\left[\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]}{k'^2-k^2}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{18.3.10}$$

对角度部分积分,并利用被积函数的奇偶性,把对 k'的积分扩展到$-\infty$

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{\exp\left[\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]}{k'^2-k^2}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\pi 2\pi\sin\vartheta\mathrm{d}\vartheta\int_0^\infty\frac{\exp\left[\mathrm{i}k'\,|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\,\cos\vartheta\right]}{k'^2-k^2}k'^2\mathrm{d}k' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{2\pi}{\mathrm{i}\,|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\int_{-\infty}^\infty\frac{k'\exp(\mathrm{i}k'\,|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{k'^2-k^2}\mathrm{d}k' \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\frac{\partial}{\partial\eta}\int_{-\infty}^\infty\frac{\exp(\mathrm{i}k'\eta)}{k'^2-k^2}\mathrm{d}k'\end{aligned} \tag{18.3.11}$$

其中 $\eta=|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$. 当 $k'=\pm k$ 时，上式分母为零，一阶奇点在实轴上. 为了求出积分，引进虚数

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=-\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\frac{\partial}{\partial\eta}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(\mathrm{i}k'\eta)}{k'^2-(k+\mathrm{i}\varepsilon)^2}\mathrm{d}k' \quad (18.3.12\mathrm{a})$$

其中 $\varepsilon>0,\varepsilon\to0$. 在复平面上，上式的两个极点在 $k'=\pm(k+\mathrm{i}\varepsilon)$，位于上半平面的一个极点是 $k'=k+\mathrm{i}\varepsilon$，取上半平面的积分回路，利用留数定理得到

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(\mathrm{i}k'\eta)}{k'^2-(k+\mathrm{i}\varepsilon)^2}\mathrm{d}k'=\lim_{\varepsilon\to0}2\pi\mathrm{i}\mathrm{Res}(k+\mathrm{i}\varepsilon)=\mathrm{i}\pi\frac{1}{k}\exp(\mathrm{i}k\eta) \quad (18.3.12\mathrm{b})$$

代入式(18.3.12a)就可得到式(18.3.6). 式(18.3.6)代入方程(18.3.5)得到

$$\psi(\boldsymbol{r})=\psi_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \quad (18.3.13)$$

上式为积分方程，求解比较困难. 但当平均作用势 $\overline{U}$ 较小(意义下面讨论)时可用迭代法求解：

0 级近似，即为入射波

$$\psi^{(0)}(\boldsymbol{r})\approx\psi_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \quad (18.3.14)$$

1 级近似，称为 **Born** 近似

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})\approx\psi_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \quad (18.3.15)$$

2 级近似

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r})\approx\psi_0\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\exp(\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \quad (18.3.16)$$

首先利用 Lippman-Schwinger 方程(18.2.13)来证明式(18.1.2)：在远场 $|\boldsymbol{r}|\gg|\boldsymbol{r}'|$，式(18.3.13)中分母可作近似 $1/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx1/|\boldsymbol{r}|$，而分子作近似

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|=(r^2-2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'+r'^2)^{1/2}\approx r\left(1-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}{r^2}\right) \quad (18.3.17)$$

代入方程(18.3.13)得到

$$\psi_s(r\to\infty)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\exp(\mathrm{i}kr)}{r}\int\exp(-\mathrm{i}k\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

其中 $\boldsymbol{e}_r$ 是散射方向的单位矢量，仅与 ϑ 和 φ 有关，与式(18.1.2)比较，显然存在关系

$$f(\vartheta,\varphi)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2\psi_0}\int\exp(-\mathrm{i}k\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \quad (18.3.18)$$

这就证明了式(18.1.2).

显然方程(18.3.13)的零级近似没有给出散射信息. 考虑一级近似,即 Born 近似,利用近似式(18.3.15)得到

$$\psi_s^{(1)}(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{m\psi_0}{2\pi\hbar^2}\frac{\exp(\mathrm{i}kr)}{r}\int U(\boldsymbol{r}')\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \qquad (18.3.19)$$

其中 $\boldsymbol{q}=k\boldsymbol{e}_r-\boldsymbol{k}$,显然 $\hbar\boldsymbol{q}$ 是散射过程中粒子动量的转移. 因此在 Born 近似下散射振幅为

$$f(\vartheta,\varphi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\boldsymbol{r}')\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \qquad (18.3.20)$$

因 $k\boldsymbol{e}_r$ 与 $\boldsymbol{k}$ 大小相等,$\boldsymbol{k}$ 与 $k\boldsymbol{e}_r$ 的夹角为 ϑ,$q=2k\sin(\vartheta/2)$. 当粒子与散射中心 A 的相互作用势为有心力势 $U(\boldsymbol{r})=U(r)$ 时,积分过程中取 $\boldsymbol{q}$ 为 z 方向,式(18.3.20)简化成

$$\begin{aligned} f(\vartheta,\varphi) &\approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi'\int_0^{\pi}\sin\vartheta'\mathrm{d}\vartheta'\int_0^{\infty}r'^2\mathrm{d}r'U(r')\exp(-\mathrm{i}qr'\cos\vartheta') \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^{\infty}r'U(r')\sin(qr')\mathrm{d}r' \equiv f(\vartheta) \end{aligned}$$

可见散射振幅与 φ 无关. 最后求得在 Born 近似下的微分散射截面为

$$\sigma(\vartheta) = \left(\frac{2m}{\hbar^2 q}\right)^2\left|\int_0^{\infty}r'U(r')\sin(qr')\mathrm{d}r'\right|^2 \qquad (18.3.21)$$

下面简单说明 Born 近似的适用范围. 设有效作用半径(力程)和平均作用势分别为 a 和 $\overline{U}$,方程(18.3.13)右边积分中用 ψ_i 代替 ψ 的条件显然是 $\psi\approx\psi_i$,即波函数变化不大. 散射前粒子的动量在 z 方向,散射后产生 x 和 y 方向的分量(但大小不变化),波函数变化较小意味着,x 和 y 方向的动量分量较小,即

$$\Delta p \ll \frac{\hbar}{a} \qquad (18.3.22)$$

在力程范围内,粒子动能变化 $\Delta E\sim\overline{U}$,故 $\Delta p=m\Delta E/p\approx m\overline{U}/p$,代入上式得到 Born 近似的条件为

$$\frac{m\overline{U}a}{\hbar p} \ll 1 \qquad (18.3.23)$$

即要求入射粒子有较大的动量. 因此 Born 近似一般适用于高能(~MeV)入射粒子的散射.

例 18.3.1 屏蔽 Coulomb 场中粒子的散射.

解: 高速带电粒子(电量为 $Z'e$)被中性原子散射,散射中心的原子核被核外电子屏蔽,这种屏蔽的 Coulomb 场可表示为

$$U(r) = -\frac{Z'Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\exp\left(-\frac{r}{a}\right) \qquad (18.3.24)$$

式中 Z 和 a 分别为散射中心的原子序和有效屏蔽半径. 上式代入式(18.3.21)

得到

$$\sigma(\vartheta)=\left(\frac{2m}{\hbar^2 q}\frac{Z'Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left|\int_0^\infty \exp\left(-\frac{r'}{a}\right)\sin(qr')\mathrm{d}r'\right|^2$$
$$=\left(\frac{2m}{\hbar^2 q}\frac{Z'Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left(\frac{q}{q^2+1/a^2}\right)^2$$
$$=\left(\frac{2m}{\hbar^2}\frac{Z'Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{(q^2+1/a^2)^2} \tag{18.3.25}$$

若入射粒子能量很高：$qa=2ka\sin(\vartheta/2)\gg 1$，则上式可近似为

$$\sigma(\vartheta)=\left(\frac{mZ'Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{4\,(k\hbar)^4\,\sin^4(\vartheta/2)} \tag{18.3.26}$$

即为经典的 Rutherford 散射公式. 注意：上式成立的条件与 ϑ 有关，只有 ϑ 较大时才成立.

18.4　全同粒子的散射

以上假定入射粒子 B 与散射中心 A 粒子不同，并且 A 的质量远大于入射粒子 B(因此可以假定 A 不动). 如果 A 和 B 是全同粒子，则 A 和 B 的质量相同，必须用质心坐标系来处理二体问题；此外，A 和 B 作为一个全同粒子系统，波函数必须满足交换对称性.

在碰撞发生前，入射粒子 B 在实验室坐标中速度为 $\boldsymbol{v}_\mathrm{b}$ 且 A 不动，质心的运动速度为

$$\boldsymbol{v}_\mathrm{c}=\frac{M_\mathrm{a}\dot{\boldsymbol{r}}_\mathrm{a}+M_\mathrm{b}\dot{\boldsymbol{r}}_\mathrm{b}}{M_\mathrm{a}+M_\mathrm{b}}=\frac{M_\mathrm{b}\boldsymbol{v}_\mathrm{b}}{M_\mathrm{a}+M_\mathrm{b}} \tag{18.4.1}$$

B 和 A 相对质心的运动速度分别为

$$\boldsymbol{v}'_\mathrm{b}=\boldsymbol{v}_\mathrm{b}-\boldsymbol{v}_\mathrm{c}=\frac{M_\mathrm{a}\boldsymbol{v}_\mathrm{b}}{M_\mathrm{a}+M_\mathrm{b}};\quad \boldsymbol{v}'_\mathrm{a}=-\boldsymbol{v}_\mathrm{c}=-\frac{M_\mathrm{b}\boldsymbol{v}_\mathrm{b}}{M_\mathrm{a}+M_\mathrm{b}} \tag{18.4.2}$$

如果 A 和 B 是全同的粒子，那么 $\boldsymbol{v}'_\mathrm{b}=\boldsymbol{v}_\mathrm{b}/2$；$\boldsymbol{v}'_\mathrm{a}=-\boldsymbol{v}_\mathrm{b}/2$，即 A 和 B 相对质心的运动速度大小相等，方向相反. 引进相对坐标 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_\mathrm{a}-\boldsymbol{r}_\mathrm{b}$，B 相对于 A 运动的 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(|\boldsymbol{r}|)\right]\Phi(\boldsymbol{r})=E\Phi(\boldsymbol{r}) \tag{18.4.3}$$

上式中 ∇^2 仅对相对坐标 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_\mathrm{a}-\boldsymbol{r}_\mathrm{b}$ 作用，μ 为折合质量 $\mu=m/2$. 碰撞发生前，B 相对于 A 为 $+z$ 方向传播的平面波，即

$$\Phi_\mathrm{i}=\Phi_0\exp(\mathrm{i}k\,|\,\boldsymbol{r}\,|\,\cos\vartheta) \tag{18.4.4}$$

注意 ϑ 为质心坐标中的散射角. 碰撞发生后，波函数为

$$\Phi(\boldsymbol{r})=\Phi_\mathrm{i}(\boldsymbol{r})+\Phi_\mathrm{s}(\boldsymbol{r}) \tag{18.4.5}$$

由于 A 和 B 是全同的粒子，$\boldsymbol{r}_a$和 $\boldsymbol{r}_b$交换后，波函数应该是对称或反对称的，而 $\boldsymbol{r}_a$和 $\boldsymbol{r}_b$交换相当于变换

$$\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r};\quad \vartheta\to\pi-\vartheta;\quad \varphi\to\pi+\varphi \tag{18.4.6}$$

对称或反对称的波函数为

$$\begin{aligned}\Phi_{S,A}(\boldsymbol{r})&=[\Phi_i(\boldsymbol{r})+\Phi_s(\boldsymbol{r})]\pm[\Phi_i(-\boldsymbol{r})+\Phi_s(-\boldsymbol{r})]\\&=[\Phi_i(\boldsymbol{r})\pm\Phi_i(-\boldsymbol{r})]+[\Phi_s(\boldsymbol{r})\pm\Phi_s(-\boldsymbol{r})]\end{aligned} \tag{18.4.7}$$

当$|\boldsymbol{r}|\to\infty$时，上式的渐近表达式为

$$\begin{aligned}\Phi_{S,A}(|\boldsymbol{r}|\to\infty)&=\Phi_0\{\exp(ik|\boldsymbol{r}|\cos\vartheta)\pm\exp[ik|\boldsymbol{r}|\cos(\pi-\vartheta)]\}\\&\quad+\Phi_0\left[\frac{f(\vartheta,\varphi)}{|\boldsymbol{r}|}\exp(ik|\boldsymbol{r}|)\pm\frac{f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)}{|\boldsymbol{r}|}\exp(ik|\boldsymbol{r}|)\right]\\&=\Phi_0[\exp(ik|\boldsymbol{r}|\cos\vartheta)\pm\exp(-ik|\boldsymbol{r}|\cos\vartheta)]\\&\quad+\Phi_0[f(\vartheta,\varphi)\pm f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)]\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}|)}{|\boldsymbol{r}|}\end{aligned}$$

因此微分散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma_{S,A}(\vartheta,\varphi)&=|f(\vartheta,\varphi)\pm f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)|^2\\&=|f(\vartheta,\varphi)|^2+|f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)|^2\\&\quad\pm2\mathrm{Re}[f^*(\vartheta,\varphi)f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)]\end{aligned} \tag{18.4.8}$$

显然最后一项是干涉项，纯粹是量子效应，是由粒子的全同性引起的.

如果考虑粒子的自旋波函数，以电子-电子散射为例，总波函数(空间部分乘自旋部分)应该是反对称的. 对两个电子组成的体系，自旋态可以是单态 $\chi_A(S=0)$或三重态 $\chi_S^\sigma(\sigma=1,2,3)(S=1)$. 单态自旋波函数 χ_A 反对称，故要求空间波函数是交换对称的. 于是

$$\sigma_S(\vartheta,\varphi)=|f(\vartheta,\varphi)+f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)|^2 \tag{18.4.9}$$

三重态自旋波函数对称，故要求空间波函数是交换反对称. 于是

$$\sigma_A(\vartheta,\varphi)=|f(\vartheta,\varphi)-f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)|^2 \tag{18.4.10}$$

设入射电子束与电子靶均未极化，统计来说，有 1/4 和 3/4 的电子分别处于单态和三重态. 因此微分散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma(\vartheta,\varphi)&=\frac{3}{4}\sigma_A(\vartheta,\varphi)+\frac{1}{4}\sigma_S(\vartheta,\varphi)\\&=|f(\vartheta,\varphi)|^2+|f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)|^2\\&\quad-\frac{1}{2}\mathrm{Re}[f^*(\vartheta,\varphi)f(\pi-\vartheta,\pi+\varphi)]\end{aligned} \tag{18.4.11}$$

可见考虑自旋后微分散射截面有较大的变化.

例 18.4.1 两个自旋为 1/2、质量为 m 的全同粒子间存在“屏蔽”Coulomb 势相互作用

$$U(r)=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\exp(-\lambda r) \tag{18.4.12}$$

式中 $1/\lambda$ 为“屏蔽”长度. 设有一散射实验,其中:(1)每个粒子在质心坐标系中都具有能量 E,设 E 很大,但仍是非相对论的;(2)入射粒子的自旋取向是随机的. 求散射截面.

解: 在质心坐标系中,两粒子是完全对称的. 相当于在两粒子连线中点,有一个固定的力心(如图 18.4.1),力心与入射粒子的作用势为

$$U(\rho)=\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0\rho}\exp(-2\lambda\rho) \tag{18.4.13}$$

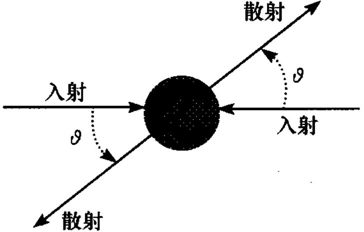


图 18.4.1　两个全同粒子的散射

其中 $\rho=r/2$ 为两粒子距离的一半. 由于 E 很大,可采用 Born 近似,故一级近似为

$$\begin{aligned}f(\vartheta)&=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(\rho)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\rho})\mathrm{d}^3\boldsymbol{\rho}\\&=-\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 q\hbar^2}\int_0^{\infty}\exp(-2\lambda\rho)\sin(q\rho)\mathrm{d}\rho=-\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2\left[q^2+4\lambda^2\right]}\end{aligned} \tag{18.4.14}$$

其中 $q=2k\sin(\vartheta/2)$. 考虑到全同粒子的交换对称性,对自旋单态,空间波函数必须对称

$$\sigma_{\mathrm{S}}=|f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)|^2 \tag{18.4.15}$$

而对自旋三重态,空间波函数必须反对称

$$\sigma_{\mathrm{A}}=|f(\vartheta)-f(\pi-\vartheta)|^2 \tag{18.4.16}$$

于是

$$\sigma_{\mathrm{S}}=\frac{1}{4}\left(\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^2\left[\frac{1}{k^2\sin^2(\vartheta/2)+\lambda^2}+\frac{1}{k^2\cos^2(\vartheta/2)+\lambda^2}\right]^2 \tag{18.4.17}$$

以及

$$\sigma_{\mathrm{A}}=\frac{1}{4}\left(\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^2\left[\frac{1}{k^2\sin^2(\vartheta/2)+\lambda^2}-\frac{1}{k^2\cos^2(\vartheta/2)+\lambda^2}\right]^2 \tag{18.4.18}$$

因入射粒子的自旋取向是随机的,故总散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{t}}&=\frac{1}{4}\sigma_{\mathrm{S}}+\frac{3}{4}\sigma_{\mathrm{A}}\\&=\frac{1}{16}\left(\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^2\frac{(k^2+2\lambda^2)^2+3k^4\cos^4\vartheta}{\left[k^2\sin^2(\vartheta/2)+\lambda^2\right]^2\left[k^2\cos^2(\vartheta/2)+\lambda^2\right]^2}.\end{aligned} \tag{18.4.19}$$

习　题　18

18.1　质量为 m 的粒子在三维情形下与一个球对称势作用 $U(r)=-C\delta(r-$

a)，其中 C 为正的常数.(1) 求存在一个束缚态的 C 的最小值；(2) 求低速入射粒子的微分散射截面及角分布.(提示：(1) 令波函数为 $\psi(r,\vartheta,\varphi)=R(r)Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ 对径向方程积分求 $r=a$ 处的边界条件；(2) 用关系 $x\geqslant 1-\exp(-x)(x\geqslant 0)$；(3) 考虑 $l=0$ 波)

答案：(1) $C_{\min}=1/a$；(2) $\sin\delta_0\approx\dfrac{ka}{1-2maC/\hbar^2}$.

18.2　在 Born 近似下计算质量为 m 的粒子被作用势 $U(\boldsymbol{r})=g\delta(\boldsymbol{r})$ 散射的微分截面.

答案：$\sigma(\vartheta)=\dfrac{m^2g^2}{\pi\hbar^4}$.

18.3　一个质量为 m、电荷为 e，动量为 p 的粒子在一个球对称电荷分布产生的静电势中散射.设电荷分布 $\rho(r)$ 满足

$$\int\rho\mathrm{d}\tau=0\quad 和\quad \int r^2\rho\mathrm{d}\tau=A\quad (A\ 为常数)$$

在 Born 近似下求微分散射截面在 $\vartheta=0$ 的值.(提示：Coulomb 势方程为

$$\nabla^2U=-\rho(r)/\varepsilon_0$$

对 $\rho(r)$ 求 Fourier 变换

$$F(\boldsymbol{q})=\int\rho(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$$

求得

$$\int U(r)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau=\frac{4\pi}{q^2}F(\boldsymbol{q})$$

然后用 $\vartheta=0$ 条件指数作展开)

答案：$\sigma(\vartheta)=A^2m^2e^2/(9\hbar^4)$.

18.4　用 Born 近似计算质量为 m 的粒子被势 $U(r)=A\exp(-r^2/a^2)$ 散射的微分截面.

答案：$\sigma(\vartheta)=\dfrac{m^2A^2a^6}{4\hbar^4}\pi\exp\left(-\dfrac{q^2a^2}{4}\right)$，$q=2k\sin\dfrac{\vartheta}{2}$.

18.5　用 Born 近似求 1keV 的质子被基态氢原子散射的微分截面.(提示：(1) 在质心坐标系内，两质子的相对能量为 $E_r=0.5\text{keV}$；(2) 氢原子核外电子看作"电子云"，作用势为

$$U(r)=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\tau'$$

对处于基态的氢原子

$$\rho(r)=|\psi_{100}|^2=\frac{1}{\pi a^3}\exp\left(-2\frac{r}{a}\right)$$

(3) 利用公式

$$\int \frac{\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})}{r}\mathrm{d}\tau = \frac{4\pi}{q^2}$$

(4) 质子和氢原子核是全同粒子

三重态 $\sigma_A = |f(\vartheta) - f(\pi-\vartheta)|^2$；单态 $\sigma_S = |f(\vartheta) + f(\pi-\vartheta)|^2$

总微分截面为 $\sigma = \frac{3}{4}\sigma_A + \frac{1}{4}\sigma_S$)

答案：$f(\vartheta) = -\frac{\mu e^2}{8\pi\varepsilon_0 \hbar^2 k^2}\frac{1}{\sin^2(\vartheta/2)}\left\{1 - \frac{1}{[1+a^2k^2\sin^2(\vartheta/2)]^2}\right\}$.

18.6　用 Born 近似计算中子-中子散射的微分截面.假设散射势对于自旋三重态为零,而对于自旋单态为

$$U(r) = U_0\frac{\exp(-\mu r)}{r}$$

对无规自旋取向的初始态计算截面.

答案：$f(\vartheta) = -\frac{2\mu U_0}{q\hbar^2}\frac{q}{q^2+\mu^2}$，$q = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}$

$\sigma_S = |f(\vartheta)+f(\pi-\vartheta)|^2$，总微分截面为 $\sigma = \sigma_S/4$.

18.7　自旋为 1/2 的全同粒子的相互作用势为

$$U(r) = \begin{cases} U_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2, & r\leqslant a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

求低能情况的微分散射截面.(提示:(1) 利用 $S^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2$，势简化为

$$U(r) = \begin{cases} -3U_0, & r\leqslant a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

(2) 只考虑 $l=0$ 的波,空间波函数对称,自旋波函数应该反对称.因此只要考虑单态)

答案：$\delta_0 = k_1 a\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1\right)$，　$k_0 = \sqrt{\frac{3mU_0}{\hbar^2}}$，　$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$.

18.8　自旋为 1/2 的粒子流被固定不动的重粒子散射,相互作用势为

$$U = C\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$$

求对自旋初态作平均后的微分散射截面.

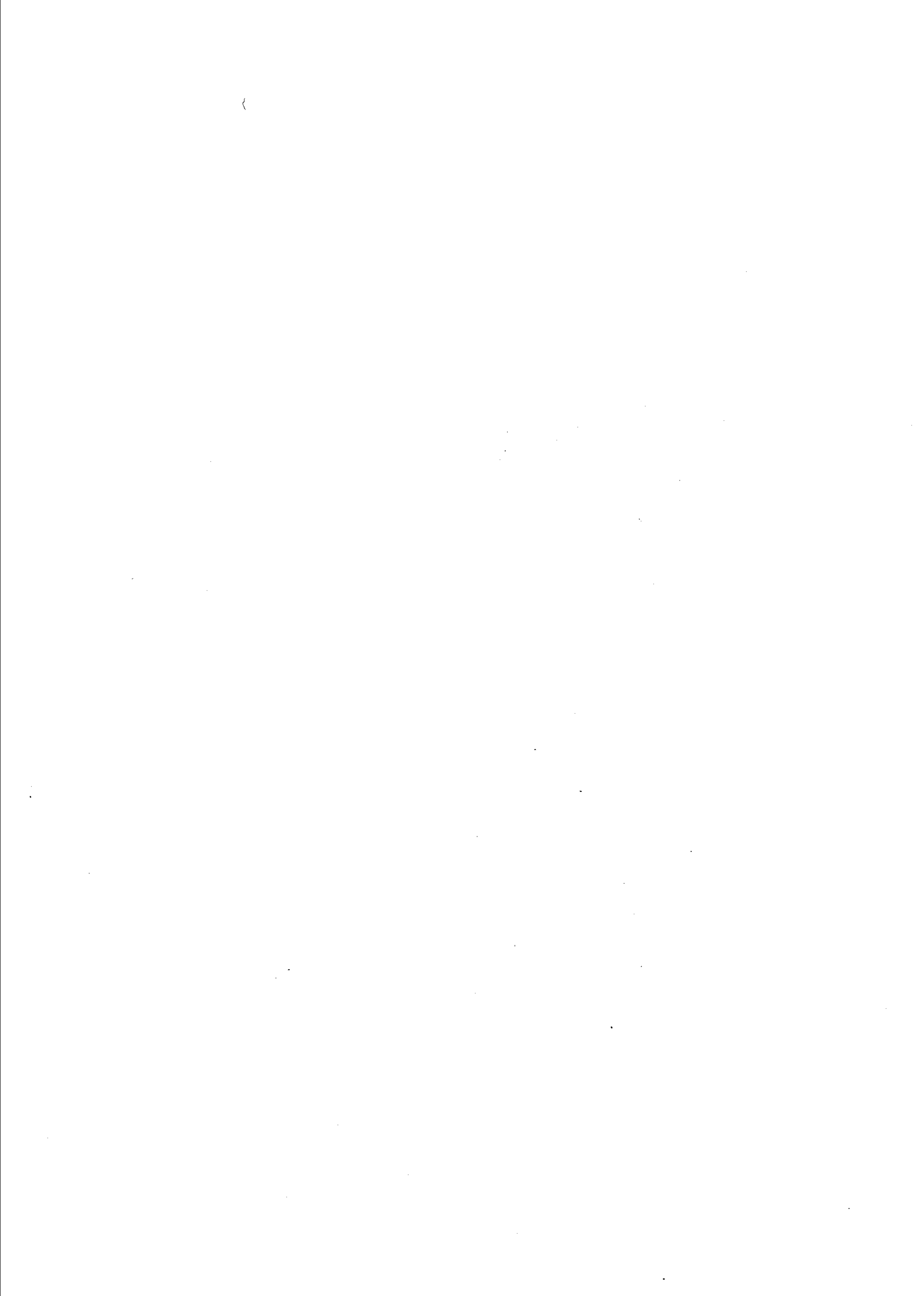
答案：$\sigma_{S,A}(\vartheta) = \left(\frac{Cm}{2\pi\hbar}\right)^2|\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2|^2$，$\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 = \frac{1}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2)$.

单态：$S=0$，三重态 $S=1$；$\sigma = \frac{1}{4}\sigma_S + \frac{3}{4}\sigma_A$.



第四部分

热力学和统计力学



第 19 章 宏观系统的热力学性质

在前面各章中，没有涉及到系统的热学性质. 特别是对弹性体和流体的运动，以讨论它们的动力学性质为主. 但它们的热力学性质往往是必不可少的. 任何系统(包括弹性体和流体)都是由微观粒子组成的，系统的行为总是个别粒子行为的集体表现. 如果给出每个粒子的状态(包括力学状态和电磁学状态等)，则系统的状态就可以完全确定下来. 但当系统包含数量级为 10^{23} 个粒子(原子或分子)时，给出每个粒子的状态是不可能的，也没有必要. 对于大数粒子系统，个别粒子的运动细节已退居极次要地位，实际上只要用少数宏观参量就可描述大数粒子系统的宏观行为. 热力学研究的是大数粒子组成的宏观系统，并且在研究系统的物理性质时，热力学只研究宏观参量的平均值，而完全忽略涨落. 当研究的问题涉及到小尺度或者粒子数较少情况时，涨落不能忽略，必须用统计物理学，我们将在第 24 章中讨论. 因此热力学属于宏观物理学，它以能量在转化过程中的两条基本定律为基础，结合具体现象中的经验规律来研究过程中各种物性变化之间的联系，不涉及物体的微观结构和粒子的运动.

19.1 热力学系统的基本概念:平衡态和热力学过程

首先介绍热力学系统、平衡态和状态参量的概念.

系统:指从相互作用着的物体系中划分出来的、需要研究的那一部分物质，它总是宏观且有限的. 所有其余的与系统相互作用的物体或物系称为**外界**. 根据系统与外界的相互作用情况，又可分为:与外界既没有物质交换也没有能量交换的系统称为**孤立系统**;与外界没有物质交换，但有能量交换的系统称为**闭系统**;与外界既有物质交换，也有能量交换的系统称为**开系统**. 当然，绝对意义上的孤立系统是不存在的，对系统进行测量要求外界对系统施加作用，并从系统取得反馈信息，这就破坏了系统的孤立性，但当系统与外界的相互作用十分微弱，其相互作用能量远小于系统本身的能量时，我们可以把系统看作孤立系统. 所以孤立系统的概念是一个理想的极限概念，在热力学和统计物理学中十分重要和有用.

平衡态:经验指出，一个孤立系统，不论其初态如何复杂，经过足够长的时间后，将会达到这样的状态，系统的各种宏观性质在长时间内不发生任何变化，这样的状态称为**热力学平衡态**. 对非孤立系统，可以把系统与外界合起来作为一个复合的孤立系统，然后根据平衡态的定义，判断系统是否处于平衡. 因此非孤立系统平

衡态不仅对系统，而且对外界媒质都有要求.

关于平衡态的几点说明：

1. 系统由其初始状态达到平衡状态所经历的时间称为**弛豫时间**，弛豫时间的长短由趋向平衡的过程性质确定. 如在扩散现象中，浓度的均匀化在气体中仅需要几分钟，而在固体中则达数小时，甚至更长的时间；

2. 在平衡状态，系统的宏观性质虽然不随时间变化，但组成系统的微观粒子仍在不断的运动中，只是这些微观粒子运动的统计平均效果不变而已. 因此热力学的平衡状态是动平衡，或称为**热动平衡**. 与力学中的平衡有大的区别；

3. 在平衡状态，系统宏观物理量的数值仍会发生或大或小的涨落，这种涨落在适当的条件下可以观察到，这是统计平均的必然结果. 对于宏观物体，在一般情况下，涨落可以忽略不计. 在热力学中，我们不考虑涨落，而认为系统宏观物理量具有确定的数值.

状态参量：平衡态可由几个宏观物理量来确定，称为**状态参量**. 状态参量分为四类，即几何参量(如流体的体积和固体的应变张量)、力学参量(如流体的压强，固体的应力张量等)、化学参量(如混合气体中各气体的组分等)和电磁参量(如考虑系统为电介质或磁介质，电磁参量包括电场或磁场强度，电极化或磁极化强度).

状态参量又可分为**内参量**和**外参量**. 外参量决定于外界的状态，如容器的体积、电磁场强度，这些都与系统本身的性质无关. 在热力学里，这些参量常作为外界条件给出；内参量取决于系统内部粒子的运动状态，如压强，取决于系统中微观粒子的热运动和粒子之间的相互作用；电介质或磁介质中的电极化和磁极化强度决定于分子的电偶极矩和磁偶极矩的大小以及它们的取向分布. 一个十分重要的内参量是温度 T，表征物体的冷热程度，它代表热运动的强度，只有对宏观系统(分子数 $N\sim10^{23}$)，温度才有意义. 后面我们将给温度一个严格的定义.

经验表明，当系统达到平衡后，内参量依赖于外参量. 例如气体的压强与体积有关、电或磁的极化与外加电场或磁场有关. 但是仅用外参量不能完全确定系统的平衡状态，还必须加上一个内参量(一般取为温度或者系统的能量)才能唯一地确定一个平衡态. 而系统的其他内参量都可以用外参量和温度来表示.

热力学量又可以分为二类，即**广延量**和**强度量**. 前者与系统的质量或物质的量成正比，如质量 m、体积 V、总磁矩 $\boldsymbol{M}$ 等；后者与系统的质量或物质的量无关，如压强 p、温度 T、磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 等. 这一特性仅在系统的粒子数 $N\to\infty$，体积 $V\to\infty$ 而密度 N/V 有限才成立. 这一极限称为**热力学极限**.

热平衡定律：设物体 1 和物体 2 各自与物体 3 达到热平衡，那么 1 与 2 也达到热平衡，这个经验称为**热平衡定律**，也称为**热力学第零定律**. 考虑简单的 p-V 系统，如果 1 与 3 达到热平衡，一定存在关系

$$\chi_{13}(p_1,V_1;p_3,V_3)=0 \tag{19.1.1}$$

由上式可以解出

$$p_3 = \Phi_{13}(p_1, V_1; V_3) \tag{19.1.2}$$

同样，如果 2 与 3 达到热平衡，一定存在关系

$$\chi_{23}(p_2, V_2; p_3, V_3) = 0 \tag{19.1.3}$$

上式可以解出

$$p_3 = \Phi_{23}(p_2, V_2; V_3) \tag{19.1.4}$$

因为 1 和 2 都与 3 达到热平衡，由上式和方程(19.1.2)得到

$$\Phi_{13}(p_1, V_1; V_3) = \Phi_{23}(p_2, V_2; V_3) \tag{19.1.5}$$

而由热平衡定律，1 与 2 也达到热平衡，即存在关系

$$\chi_{12}(p_1, V_1; p_2, V_2) = 0 \tag{19.1.6}$$

上式应该从方程(19.1.5)直接推得. 因此方程(19.1.5)两边的 V_3 变量应该可以消去，得到

$$g_1(p_1, V_1) = g_2(p_2, V_2) \tag{19.1.7}$$

说明：当 1 与 2 处于热平衡状态时，存在态函数(即只与系统的状态有关)$g_1(p_1, V_1)$和 $g_2(p_2, V_2)$，它们相等，这个态函数就是温度 T. 因此处在平衡态下的系统，存在态函数温度 T，表征物体的冷热程度. **热平衡定律的重要性在于定义了温度这个态函数.**

热平衡定律不仅给出了温度的概念，而且指明了比较温度的方法. 由于互为热平衡的物体具有相同的温度，在比较两个物体的温度时，不需要将两物体直接进行热接触，只须取一个标准的物体分别与这两个物体进行热接触就行了. 这个作为标准的物体就是**温度计**. 要定量地确定温度的数值，还必须对不同的冷热程度给予数值的表示，即确定温标. 现在人们约定用理想气体温标作为标准. 以定容气体温度计为例，保持气体温度计中的体积不变，以气体压强随其冷热程度的改变作为标志来规定气体的温度，并且规定纯水的三相点温度(水、冰和水蒸气三相平衡共存的温度，见第 20 章讨论)为 273.16K. 以 p_t 表示在三相点下温度计中气体的压强，当温度计中气体的压强为 p 时，规定这时气体的温度为 T_V

$$T_V = 273.16\text{K}\,\frac{p}{p_t} \tag{19.1.8}$$

显然这样规定的温标与气体的性质有一定的关系(尽管关系很小). 实验表明：在压强趋于零的极限下，各种气体所确定的 T_V 趋于一个共同的极限值，这个极限温标称为**理想气体温标**，用 T 表示

$$T = 273.16\text{K} \times \lim_{p_t \to 0}\left(\frac{p}{p_t}\right) \tag{19.1.9}$$

式中 K 为温度的单位. 在热力学第二定律(见 19.3 节讨论)的基础上可以引入一种不依赖于任何具体物质特性的温标，称为**热力学温标**. 热力学温标是热力学理论

和近代科学使用的标准温标. 可以证明:在理想气体温标可以使用的温度范围内(在极低温,必须考虑量子气体效应,温度与压强不是简单的线性关系,见第 22 章讨论),理想气体温标与热力学温标一致,我们将在 19.3 节讨论.

物态方程:实验表明一个热力学系统的平衡态可以由它的状态参量(即几何参量、力学参量、化学参量和电磁参量)的数值确定. 热平衡定律表明了在平衡状态下热力学系统存在态函数温度. 物态方程就是给出温度与状态参量之间的函数关系的方程. 在热力学理论中,物态方程只能由实验决定,但在统计力学中,只要给出了组成系统的分子、原子或离子之间的相互作用力,原则上可从统计物理理论导出物态方程. 对气体、液体和固体等简单的热力学系统,可以用体积 V 和压强 p(称为 $p-V$系统)来描述它们的平衡态. 注意:如果考虑固体的弹性动力学性质,或者如果液体存在黏滞,就不能简单地用压强描述,由第 3 章和第 4 章讨论可知,必须引入应力张量来描述.

一个重要的物态方程是理想气体的物态方程,即

$$pV = Nk_{\mathrm{B}}T \tag{19.1.10}$$

其中 N 是分子数,k_{B} 是 Boltzmann 常量. 理想气体反映了各种实际气体在压强趋向于零时的共同极限性质. 在一般压力和温度条件下,实际气体可近似于理想气体,因此在精确度允许的范围内,往往把气体当作理想气体. 理想气体是一个十分重要的理论模型. 对液体和固体系统,写出统一的物态方程是困难的,一般通过实验测量液体和固体的体膨胀系数 α 和等温压缩系数 κ_T 获得有关物态方程的信息. 系数 α 和 κ_T 定义如下

$$\alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p; \quad \kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \tag{19.1.11}$$

体膨胀系数 α 的含义为:在压强保持不变的条件下,温度升高 1K 所引起的物体体积的相对变化;等温压缩系数 κ_T 的含义为:在温度保持不变的条件下,增加单位压强所引起的物体体积的相对变化.

例 19.1.1 已知某气体的体膨胀系数 α 和等温压缩系数 κ_T 分别为

$$\alpha = \frac{1}{T}\left(1+\frac{3a}{VT^2}\right); \quad \kappa_T = \frac{1}{p}\left(1+\frac{a}{VT^2}\right) \tag{19.1.12}$$

其中 a 为常量,求物态方程.

解: 设气体的物态方程为 $p=p(T,V)$,其微分表达式为

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}p &= \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \mathrm{d}V \\
&= -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \mathrm{d}V \\
&= \frac{\alpha}{\kappa_T}\mathrm{d}T - \frac{1}{V\kappa_T}\mathrm{d}V
\end{aligned} \tag{19.1.13}$$

上式中应用了隐函数微分关系(见习题 19.1)

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_p = -1 \tag{19.1.14}$$

把方程(19.1.12)代入式(19.1.13)

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}p}{p} &= \frac{1}{T}\left[\frac{1+3a/(VT^2)}{1+a/(VT^2)}\right]\mathrm{d}T - \frac{1}{V\left[1+a/(VT^2)\right]}\mathrm{d}V \\ &= \frac{\mathrm{d}T}{T} - \frac{\mathrm{d}V}{V} - \frac{\mathrm{d}\left[a/(VT^2)\right]}{1+a/(VT^2)}\end{aligned} \tag{19.1.15}$$

积分后得到

$$\ln p = \ln T - \ln V - \ln\left(1 + \frac{a}{VT^2}\right) + \ln C \tag{19.1.16}$$

其中 C 是积分常数. 上式即为

$$p = \frac{CT}{V\left(1+\frac{a}{VT^2}\right)} \tag{19.1.17}$$

为了决定常数,考虑

$$\lim_{V\to\infty} pV = CT \tag{19.1.18}$$

气体趋向理想气体,比较方程(19.1.10)得到 $C = Nk_B$.

研究处于平衡态永远不变的系统意义不大,一个热力学系统总要发生变化,如压强、体积和温度的变化. 热力学系统的状态变化称为**热力学过程**. 下面介绍几种特殊的热力学过程.

可逆过程:当外界按原过程的逆过程恢复到原状态时,系统亦将按照自己的逆过程回到初态,那么这个过程称为**可逆过程**,反之称为不可逆过程. 典型的例子是:不存在耗散的声振动过程是可逆过程;而扩散(热扩散或者浓度扩散)过程是不可逆过程. 一个过程的可逆性与描述过程的微分方程的时间反演不变性相联系,如果微分方程是时间反演不变的,那么过程就是可逆的,反之就不可逆.

准静态过程:如果一个过程进行得足够慢,使过程中的每一个状态非常接近于平衡态,那么称这个过程为**准静态过程**. 显然准静态过程是一个理想的极限概念,但它在热力学中有着非常重要的地位. 准静态过程的一个重要性质是:如果系统不存在摩擦阻力,外界在准静态过程中对系统的作用力可以用描写系统平衡状态的参量表达出来. 例如,当气体作无摩擦的准静态膨胀或压缩时,为了维持气体在平衡状态,外界的压强必须等于气体的压强,因而是描述气体平衡态的一个参量. 当存在摩擦时,即使过程进行得十分缓慢,使过程中每个状态都达到平衡状态,但外界的压强也不等于气体的压强(摩擦力抵消一部分外界的力). 在以后的讨论中,准静态过程一般指没有摩擦力的准静态过程.

绝热过程:一个过程中,如果系统状态的变化完全是由于机械作用或电磁作用

的结果而没有受到其他的影响，称为**绝热过程**. 实验表明，系统经绝热过程（包括非准静态的绝热过程）从初态变化到终态，在过程中外界对系统所做的功仅取决于系统的初态和终态而与过程无关. 因此，可以用绝热过程中外界对系统所做的功定义一个态函数 U：$\bar{d}W=dU$. 态函数 U 称为系统的**内能函数**. 从微观的角度，内能是系统中粒子无规运动的能量总和的统计平均. 注意：态函数的微分是全微分，我们用"d"表示，而用"$\bar{d}$"表示非态函数的微分.

19.2 热力学第一定律、Carnot 循环和焓

首先介绍**功**的概念. 设在准静态过程中，系统在外界的作用下，体积变化 dV，那么外界对系统做的功为

$$\bar{d}W = -p_{外}\,dV \tag{19.2.1}$$

上式中负号的意义是：如果系统变小，$dV<0$，外界做正功；如果系统变大，$dV>0$，外界做负功，即系统对外界做正功. 我们考虑的是没有摩擦力的准静态过程：$p_{外}=p$，故

$$\bar{d}W = -p dV \tag{19.2.2}$$

上式是对简单的 p-V 系统，其他系统元功的形式如下.

1. 电介质系统，由式(8.1.28c)，单位体积的元功为

$$\bar{d}W = \boldsymbol{E}\cdot d\boldsymbol{D} \tag{19.2.3}$$

其中 $\boldsymbol{E}$ 是外电场强度，$\boldsymbol{D}$ 是介质的电位移强度. 由 $\boldsymbol{D}=\varepsilon_0\boldsymbol{E}+\boldsymbol{P}$ 得

$$\bar{d}W = \boldsymbol{E}\cdot d(\varepsilon_0\boldsymbol{E}+\boldsymbol{P}) = \frac{1}{2}\varepsilon_0 d(E^2)+\boldsymbol{E}\cdot d\boldsymbol{P} \tag{19.2.4}$$

上式表明：外界对系统做的功分两部分：①激发电场做的功，使电场的能量密度增加；②第二部分为使介质极化做的功；

2. 磁介质系统，由式(8.2.14e)，单位体积的元功为

$$\bar{d}W = \boldsymbol{H}\cdot d\boldsymbol{B} \tag{19.2.5}$$

其中 $\boldsymbol{H}$ 是磁场强度，$\boldsymbol{B}$ 是介质的磁感应强度. 由 $\boldsymbol{B}=\mu_0(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M})$ 得

$$\bar{d}W = \mu_0\boldsymbol{H}\cdot d(\boldsymbol{H}+\boldsymbol{M}) = \frac{1}{2}\mu_0 d(H^2)+\mu_0\boldsymbol{H}\cdot d\boldsymbol{M} \tag{19.2.6}$$

上式表明外界对系统做的功分两部分：①激发磁场做的功，使磁场的能量密度增加；②第二部分为使介质磁化做的功；

3. 表面系统

$$\bar{d}W = \sigma dA \tag{19.2.7}$$

其中 σ 为表面张力，A 为表面膜的面积.

因此，外界对系统做的微功可以写成普遍形式

$$\bar{d}W = \sum_i Y_i dy_i \tag{19.2.8}$$

其中 Y_i 是**广义力**，y_i 是相应的**广义位移**. 在准静态过程中，广义位移的微变化可以表示为外参量和温度的微变化.

我们用绝热过程定义了态函数内能，那么在非绝热过程又如何呢？实验表明，在非绝热过程中，外界对系统所做的功不等于系统内能的增加，而是相差一个量

$$dU - \bar{d}W = \bar{d}Q \tag{19.2.9}$$

其中 $\bar{d}Q$ 称为**热量**. 因此在非绝热过程中，系统内能的增加等于外界对系统所做的功以及系统从外界吸收的热量，即

$$dU = \bar{d}W + \bar{d}Q \tag{19.2.10}$$

这是热力学第一定律的数学表示，故热力学第一定律也就是**能量守恒定律**，其具体表述是：**自然界一切物质都具有能量，能量有各种形式，可以从一种形式转化为另一种形式，或者从一个物体传递到另一个物体，在转化与传递过程中能量的总值不变**. 自从 Joule 在 19 世纪以无可辩驳的精确实验结果证明机械能、电能、内能之间的转化满足能量守恒关系之后，人们就公认能量守恒定律是自然界的一个普遍规律，适用于一切形式的能量. 热力学第一定律也表述为：第一类永动机不可能实现. 所谓第一类永动机就是不需要能源而能对外不断地做功的机器. 显然第一类永动机违反了能量守恒定律，能量不能无中生有，做功的系统必有能量来源，能量来源或取之于外界，或取之于自身，或取之于两者.

注意：热量 Q 与功 W 都不是态函数，但它们之和内能 U 是态函数. 方程 (19.2.10) 对过程是否准静态无关，仅要求初态与终态是平衡态即可. 因此，通过热力学第一定律，定义了热量. 热量只有在过程中才有意义，对于一个平衡态，热量是无意义的. 对简单的 $p-V$ 系统，热力学第一定律表示为

$$dU = \bar{d}Q - p dV \tag{19.2.11}$$

由于内能是态函数，当系统进行一个循环过程回到原来状态时，上式左边变化应该为零，即

$$0 = \oint \bar{d}W + \oint \bar{d}Q \tag{19.2.12}$$

或者写成

$$\Delta Q = - \Delta W \tag{19.2.13}$$

而 $-\Delta W$ 表示系统对外界做的功，故上式意味着：**系统经循环过程对外界作的功等于系统吸收的热量**. 如果外界不供给能量，该系统不能对外做功. 一个十分重要的循环过程是理想气体的**可逆 Carnot 循环**，它由两个绝热过程和两个等温过程组成，如图 19.2.1，这

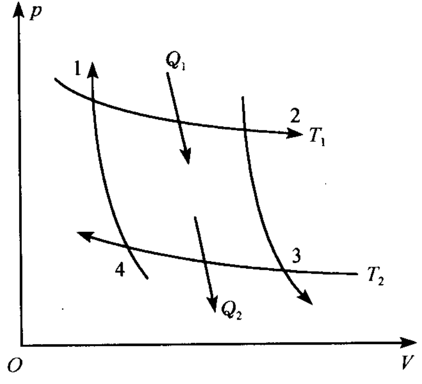


图 19.2.1　Carnot 循环

四个过程是：

1. 1→2，等温膨胀过程. 因理想气体的内能只与温度有关(见例 19. 3. 1)，等温膨胀过程中内能不变，系统在膨胀过程对外做的功等于从温度为 T_1 的高温热源中吸收的热量 Q_1，即

$$Q_1 = W_{1\to2} = \int p\mathrm{d}V = Nk_{\mathrm{B}}T_1\int_{V_1}^{V_2}\frac{\mathrm{d}V}{V} = Nk_{\mathrm{B}}T_1\ln\frac{V_2}{V_1} \qquad (19.2.14)$$

式中已利用理想气体的状态方程；

2. 2→3，绝热膨胀过程. 在过程中系统通过内能的减少来对外界做功

$$W_{2\to3} = \Delta U = U(T_1) - U(T_2) > 0 \qquad (19.2.15)$$

3. 3→4，等温压缩过程. 在过程中外界对系统做功，而系统在温度为 T_2 的低温热源放出热量

$$Q_2 = W_{3\to4} = \int p\mathrm{d}V = Nk_{\mathrm{B}}T_2\int_{V_3}^{V_4}\frac{\mathrm{d}V}{V} = Nk_{\mathrm{B}}T_2\ln\frac{V_4}{V_3} \qquad (19.2.16)$$

4. 4→1，绝热压缩过程. 系统内能增加，外界对系统做功，即系统对外界做负功

$$W_{4\to1} = \Delta U = U(T_2) - U(T_1) < 0 \qquad (19.2.17)$$

在四个过程中系统对外界做的总功为

$$\begin{aligned} W &= W_{1\to2} + W_{2\to3} + W_{3\to4} + W_{4\to1} \\ &= Nk_BT_1\ln\frac{V_2}{V_1} + Nk_BT_2\ln\frac{V_4}{V_3} \end{aligned} \qquad (19.2.18)$$

利用理想气体绝热过程的状态方程 $TV^{\gamma-1}=C$(C 为常数，γ 为定压热容量与定容热容量之比，见习题 19. 3)

$$T_1V_2^{\gamma-1} = T_2V_3^{\gamma-1}, \quad T_2V_4^{\gamma-1} = T_1V_1^{\gamma-1} \qquad (19.2.19)$$

即有

$$\frac{V_2}{V_1} = \frac{V_3}{V_4} \qquad (19.2.20)$$

于是式(19. 2. 18)变成

$$W = Nk_B(T_1 - T_2)\ln\frac{V_2}{V_1} = Q_1\frac{T_1 - T_2}{T_1} \qquad (19.2.21)$$

在这四个过程中，第一个过程中系统从外界吸收热量 Q_1(在高温热源)，在第三个过程中系统又放出热量 Q_2(在低温热源)，只有部分热量变成了对外界做的功 $W=Q_1-Q_2$，故定义效率 $\eta=W/Q_1=(Q_1-Q_2)/Q_1$，则

$$\eta = \frac{Q_1 - Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} = \frac{T_1 - T_2}{T_1} = 1 - \frac{T_2}{T_1} \qquad (19.2.22)$$

可见，系统从外界吸收的热量只有一部分转变为功，做功的这部分大小决定这个循环过程把热转变为功的能力.

热容量与焓：热量是在热力学过程中传递的一种能量，与过程有关. 一个热力学系统在某一过程中温度上升 1K 所吸收的热量，称为系统在该过程的热容量，用 C 表示，即

$$C = \lim_{\Delta T \to 0} \frac{\Delta Q}{\Delta T} \tag{19.2.23}$$

其中 ΔQ 为系统在过程中温度上升 ΔT 所需吸收的热量. 在实际问题中，经常用到系统在等容过程或者等压过程的热容量，定义如下：在等容过程中，外界对系统不做功 $\Delta W=0$，故

$$C_V = \lim_{\Delta T \to 0} \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_V = \lim_{\Delta T \to 0} \left(\frac{\Delta U}{\Delta T}\right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \tag{19.2.24}$$

而在等压过程中，外界对系统做的功为 $\Delta W=-p\Delta V$，故

$$\begin{aligned} C_p &= \lim_{\Delta T \to 0} \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_p = \lim_{\Delta T \to 0} \left(\frac{\Delta U + p\Delta V}{\Delta T}\right)_p \\ &= \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_p + p \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \end{aligned} \tag{19.2.25}$$

引进新的态函数 H(见第 20 章讨论)

$$H = U + pV \tag{19.2.26}$$

显然在等压过程中

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V \tag{19.2.27}$$

这正是在等压过程中系统从外界吸收的热量，即：**在等压过程中系统从外界吸收的热量等于态函数焓的增加**.

19.3　热力学第二定律、Carnot 定理和熵增加定理

热力学第一定律仅指出：在一个热过程中系统的总能量守恒，但没有对热力学过程的方向作出任何限制. 在热力学中，过程的方向是非常重要的，如高温物体自发地把热量传给低温物体；浓度高的地方，粒子自发地向浓度低的地方扩散，反过来的过程是不可能自发进行的.

根据实验，人们发现了热力学的第二个基本定律：**不可能把热量从低温物体传到高温物体而不引起其他变化**. 第二定律也可表述为：**不可能从单一热源吸热使之完全变成有用的功而不引起其他变化**. 这里“不引起其他变化”指系统的体积等变化. 第二定律说明：一个物体的内能不可能完全变成功而不引起其他变化，但是功却可以完全地变成内能. 因此，功转化成内能这个过程具有单向性，是不可逆的.

虽然热力学第二定律是由功转化成内能具有单向性提出的，实际上它隐含指出其他不可逆过程的单向性. 所以热力学第二定律是所有单向变化过程的共同规律. 那么，能否从第二定律出发，找到一个表征不可逆过程的物理量呢？回答是肯

定的，它就是系统的熵(Entropy). 为了定义系统的熵，把方程(19. 2. 22)写成形式

$$\frac{Q_2}{T_2}=\frac{Q_1}{T_1} \tag{19.3.1}$$

我们规定：系统吸收热量为正，放出热量为负，则上式可写成

$$\frac{Q_1}{T_1}+\frac{Q_2}{T_2}=0 \tag{19.3.2}$$

(19. 3. 2)式是从 Carnot 循环推得的，Carnot 循环只有一个吸热的高温热源和一个放热的低温热源. 把 Carnot 循环作推广，假定存在一系列热源，温度为 $T_i(i=1,2,\cdots,n)$，在循环过程中，系统从热源吸取的热量为 $Q_i(i=1,2,\cdots,n)$(注意：现在 Q_i 可正可负). 引进一个温度为 T_0 的辅助热源. 系统在辅助热源与热源 T_i 之间形成一个 Carnot 循环，从辅助热源吸收热量 Q_i^0，在热源 T_i 放出热量. 由式(19. 3. 2)

$$Q_i^0=-T_0\frac{Q_i}{T_i}\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{19.3.3}$$

两边求和得到

$$Q^0\equiv\sum_{i=1}^{n}Q_i^0=-T_0\sum_{i=1}^{n}\frac{Q_i}{T_i} \tag{19.3.4}$$

其中 Q^0 为从辅助热源吸收的总热量. 而辅助热源是假想存在的，应该 $Q^0=0$. 于是

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{Q_i}{T_i}=0 \tag{19.3.5}$$

上式即为方程(19. 3. 2)的推广. 当 $n\to\infty$，上式变成积分

$$\oint\frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T}=0 \tag{19.3.6}$$

其中 $\bar{\mathrm{d}}Q$ 为系统吸(或放)的热量，T 为热源温度. 由上式可见，一个循环后 $\bar{\mathrm{d}}Q/T$ 的积分为零. 因此 $\bar{\mathrm{d}}Q/T$ 必是状态的函数. 于是可以定义态函数

$$\mathrm{d}S=\frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} \tag{19.3.7}$$

这个态函数称为系统的**熵**. 因 Carnot 循环是一个可逆循环，系统温度等于热源的温度，故 T 是热源的温度，也是系统的温度. 从上式可见，尽管热量 $\bar{\mathrm{d}}Q$ 不是态函数，但熵 S 是一个态函数.

如果循环过程是不可逆的，情形又如何呢？首先证明所谓 **Carnot 定理：系统在两个一定温度的热源之间的所有循环中，以可逆循环的效率最高.**

证明：设有两个系统(系统 R 和系统 I，也称为**热机**)，分别经历可逆循环和不可逆循环，在高温热源(温度为 T_1)吸收热量 Q_1. 系统 R 经历可逆循环后在低温热源(温度为 T_2)放出热量 Q_2；而系统 I 在经历不可逆循环后在低温热源(温度为 T_2)放出热量 Q_2'. 二个系统的效率分别为

$$\eta_{\mathrm{R}}=\frac{W}{Q_1}=\frac{Q_1-Q_2}{Q_1};\quad \eta_{\mathrm{I}}=\frac{W'}{Q_1}=\frac{Q_1-Q_2'}{Q_1} \tag{19.3.8}$$

用反证法,假定 $\eta_1>\eta_R$,即 $W'>W$,$Q_2'<Q_2$.

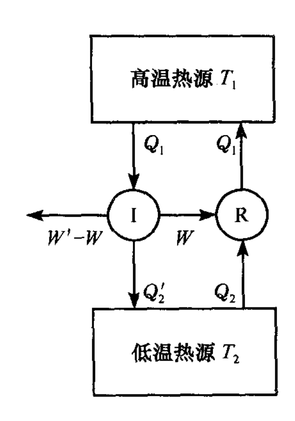


图 19.3.1　系统 R 和 I 联合起来

现在把系统 R 和 I 联合起来(如图 19.3.1). 由于对系统 R 而言,经历的循环过程是可逆的,也就是:只要外界对系统 R 做功 W,逆循环过程可以在低温热源吸收热量 Q_2 而在高温热源放出热量 Q_1. 因假定 $W'-W>0$,可以把多出部分($W'-W$)作为系统对外界做功,而 W 部分实现对系统 R 的逆循环过程. 在逆过程中,系统在低温热源吸收热量 Q_2,而在高温热源放出热量 Q_1(保证效率为 η_R). 于是,系统 I 在高温热源吸收热量 Q_1,而系统 R 在高温热源放出热量 Q_1,总的效果为零;系统 I 在低温热源放出热量 Q_2',而系统 R 在低温热源吸收热量 Q_2,总效果为系统 R 和 I 在低温热源吸收热量 $Q_2-Q_2'>0$,并且对外作功($W'-W$). 即系统 R 和 I 从单一的低温热源吸收热量完全变成了有用的功($W'-W$),而这是违背热力学第二定律的. 因此只有 $W'<W$ 和 $Q_2<Q_2'$,即 $\eta_1<\eta_R$.

Carnot 定理的直接推论是:所有工作于两个一定温度之间的可逆热机,其效率相等. 事实上,在证明 Carnot 定理的过程中,我们并没有对系统 R 和 I 的具体性质(工作物质)和整个循环过程的具体细节作要求. 设存在两个可逆热机 R_1 和 R_2,其效率分别为 η_1 和 η_2,因为 R_1 是可逆热机,故 $\eta_1\geqslant\eta_2$;而 R_2 也是可逆热机,故 $\eta_2\geqslant\eta_1$. 两式同时成立的条件为 $\eta_1=\eta_2$.

由以上结论,既然我们已经知道理想气体组成的可逆 Carnot 循环的效率为 $(1-T_2/T_1)$,那么对**任何物质**组成的循环过程都应该有关系

$$\eta=1-\frac{Q_2}{Q_1}\leqslant 1-\frac{T_2}{T_1} \tag{19.3.9}$$

即

$$\frac{Q_2}{T_2}\geqslant\frac{Q_1}{T_1} \tag{19.3.10}$$

注意:上式已由 Carnot 定理推广到对任何物质都成立. 同样我们规定:系统吸收热量为正,放出热量为负,则不等式可写成

$$\frac{Q_1}{T_1}+\frac{Q_2}{T_2}\leqslant 0 \tag{19.3.11}$$

式(19.3.6)变成

$$\oint\frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T}\leqslant 0 \tag{19.3.12}$$

考虑一个有两部分构成的循环过程:从状态 A 到状态 B 的过程 1 是可逆过程,而从状态 B 到状态 A 过程 2 是不可逆过程,由上式得到

$$\int_1 \frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} + \int_2 \frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} \leqslant 0 \tag{19.3.13}$$

因为过程 1 是可逆过程，态函数熵 S 与 $\bar{\mathrm{d}}Q$ 在过程 1 中有关系式(19.3.7)(注意：尽管我们用可逆过程系统吸收的热量 $\bar{\mathrm{d}}Q$ 与系统温度 T 之比定义了熵 S，但态函数熵 S 的存在不依赖于过程)，故上式化成

$$S_{\mathrm{B}} - S_{\mathrm{A}} + \int_{\mathrm{B}}^{\mathrm{A}} \frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} \leqslant 0 \tag{19.3.14}$$

即

$$\Delta S = S_{\mathrm{A}} - S_{\mathrm{B}} \geqslant \int_{\mathrm{B}}^{\mathrm{A}} \frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} \tag{19.3.15}$$

故从状态 B 到状态 A 的不可逆过程中，熵的变化大于 $\bar{\mathrm{d}}Q/T$ 的积分. 对于不可逆微变化

$$\mathrm{d}S \geqslant \frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} \tag{19.3.16}$$

等号对可逆过程成立. 上式意味着：系统从热源中吸收的热量与温度之比不可能大于系统的熵变化，这就是热力学第二定律的数学表达式.

对绝热过程 $\bar{\mathrm{d}}Q=0$，那么

$$\mathrm{d}S \geqslant 0 \tag{19.3.17}$$

故**绝热过程中系统的熵一定增加**，称为**熵增加定理**. 对非绝热过程，熵增加定理不一定成立，但是可以把系统和外界媒质组合起来作为一个大的系统，而大系统可看成是绝热的，熵增加定理对大系统成立. 因此我们可以说，任何自发的不可逆过程，只能向熵增加的方向进行(因为自发的过程无须外界的变化)，直至熵极大的平衡态.

例 19.3.1 实验证明，理想气体的内能仅是温度的函数而与体积无关(Joule 定律)，求理想气体的熵.

解： 因内能仅是温度的函数，故 $\mathrm{d}U = C_V \mathrm{d}T$，因此

$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}U + p\mathrm{d}V}{T} = \frac{\mathrm{d}U}{T} + \frac{p\mathrm{d}V}{T} = C_V \frac{\mathrm{d}T}{T} + \frac{p\mathrm{d}V}{T} \tag{19.3.18}$$

由理想气体的物态方程(19.1.10)

$$\mathrm{d}S = C_V \frac{\mathrm{d}T}{T} + Nk_{\mathrm{B}} \frac{\mathrm{d}V}{V} \tag{19.3.19}$$

故

$$S = \int C_V \frac{\mathrm{d}T}{T} + Nk_{\mathrm{B}} \ln V + S_0 \tag{19.3.20}$$

如果在温度变化的范围内 C_V 为常量，那么

$$S \approx C_V \ln T + Nk_{\mathrm{B}} \ln V + S_0 \tag{19.3.21}$$

设理想气体由初态(T,V_A)经绝热自由膨胀过程到终态(T,V_B)，那么熵的变化为

$$S_B - S_A = Nk_B\ln\frac{V_B}{V_A} \tag{19.3.22}$$

注意：在绝热自由膨胀过程中，内能和温度都不变化.

值得注意的是：我们从可逆过程定义了系统的熵，事实上熵是一个反映系统内部特征的量，是一个内参量. 我们由方程(19.3.7)定义了熵，但它本身的意义却独立于可逆过程，在统计物理里，我们将给出熵的严格定义.

粒子数可变情形：利用(19.2.8)和(19.3.7)，对一个可逆的准静态过程，热力学第一定律可表示为

$$dU = TdS + \sum_i Y_i dy_i \tag{19.3.23}$$

上式表明：系统内能的改变可以通过吸收热量或对系统作功来进行. 但也可以通过直接给系统输入粒子来改变系统的内能，这时热力学第一定律的数学表达式又如何呢？设每单位摩尔的粒子进入系统时，系统的内能增加 μ(称为**化学势**)，假定热力学微过程中有 dn 摩尔数的粒子进入系统，那么上式可推广为

$$dU = TdS + \sum_i Y_i dy_i + \mu dn \tag{19.3.24}$$

对简单的 p-V 系统，对广延量 U、S 和 V 引入摩尔内能 u、摩尔体积 v 和摩尔熵 s(分别为一摩尔粒子的内能、体积和熵)，那么

$$U = nu,\quad V = nv,\quad S = ns \tag{19.3.25}$$

代入 $dU = TdS - pdV + \mu dn$ 并且注意到单位摩尔系统的第一定律

$$du = Tds - pdv \tag{19.3.26}$$

得到

$$\mu = u + pv - Ts \tag{19.3.27}$$

热力学温标：由 Carnot 定理，可逆 Carnot 循环过程的效率与整个过程的具体细节和系统的具体性质(工作物质)无关，而只与两个热源的温度有关，设 ϑ_1 和 ϑ_2 为用某种温标测量的热源温度. 可逆 Carnot 循环过程中，在高温热源 ϑ_1 吸收热量 Q_1，而在低温热源 ϑ_2 放出热量 Q_2，则

$$\eta = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} \equiv 1 - \Theta(\vartheta_1, \vartheta_2) \tag{19.3.28}$$

设想存在第三个热源，温度为 ϑ_3. 热源 ϑ_1 和 ϑ_3 也可以构成一个可逆 Carnot 循环，在热源 ϑ_3 吸收热量 Q_3，而在热源 ϑ_1 放出热量 Q_1，即

$$\frac{Q_1}{Q_3} = \Theta(\vartheta_1, \vartheta_3) \tag{19.3.29}$$

现在把这二个循环过程联合起来，如图 19.3.2：在第一个循环中，系统在热源 ϑ_1 吸收热量 Q_1；而在第二个循环中，系统在热源 ϑ_1 放出热量 Q_1，相互抵消. 实际效果

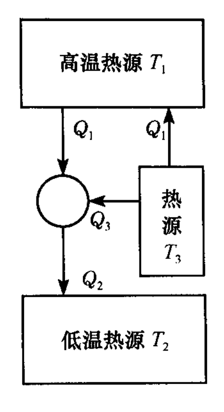


图 19.3.2 两个循环过程联合起来

等于：系统在热源 ϑ_3 吸收热量 Q_3，而在热源 ϑ_2 放出热量 Q_2，于是热源 ϑ_2 和 ϑ_3 构成一个可逆 Carnot 循环，即

$$\frac{Q_2}{Q_3} = \Theta(\vartheta_2, \vartheta_3) \tag{19.3.30}$$

上二式相除得到

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{\Theta(\vartheta_2, \vartheta_3)}{\Theta(\vartheta_1, \vartheta_3)} \tag{19.3.31}$$

上式与方程(19.3.28)比较，显然有

$$\Theta(\vartheta_1, \vartheta_2) = \frac{\Theta(\vartheta_2, \vartheta_3)}{\Theta(\vartheta_1, \vartheta_3)} \tag{19.3.32}$$

而热源 ϑ_3 是任意引进的，上式左边与 ϑ_3 无关，则右边分子和分母一定消去 ϑ_3，因此函数的形式只能是

$$\Theta(\vartheta_2, \vartheta_3) = f(\vartheta_2) f(\vartheta_3); \quad \Theta(\vartheta_1, \vartheta_3) = f(\vartheta_1) f(\vartheta_3)$$

即

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{f(\vartheta_2)}{f(\vartheta_1)} \tag{19.3.33}$$

f 的具体形式与温标的选择有关. 现在选择一种温标，以 T^* 表示用这种温标计测量的温度，使 $f(T^*) \sim T^*$，则

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{T_2^*}{T_1^*} \tag{19.3.34}$$

可见两个温度的比值是用可逆 Carnot 循环过程中系统与热源交换的热量的比值来定义的，由于比值 Q_2/Q_1 与工作物质的性质无关，由此引进的温标显然不依赖于任何具体的物质，而是一种绝对的温标，称为**热力学温标**. 如果可逆 Carnot 循环中工作物质为理想气体，则

$$\frac{Q_2}{Q_1} = \frac{T_2}{T_1} \tag{19.3.35}$$

式中 T_1 和 T_2 是用理想气体温标计量的温度. 由于理想气体温标和热力学温标都规定水的三相点的温度为 273.16K，所以在理想气体温标适用的范围内，两种温标是一致的，统一用 T 表示.

19.4 不可逆过程、局部平衡和最小熵产生定理

我们主要介绍可逆过程的平衡态热力学. 对于不可逆过程，仅在本节中作一介绍. 由上节我们得到了不等式关系 $dS \geqslant \bar{d}Q/T$. 它给出了不可逆过程进行的方向，但不能对过程作定量的描述. 自然界中存在大量的不可逆过程，如热传导、扩散等输运过程、化学反应过程，乃至生命过程. 在不可逆过程中系统经历一系列的非平

衡态，所以将热力学推广到非平衡态，对不可逆过程进行研究是非常必要的. 非平衡态按照它离开平衡态的远近可分为近平衡区和远平衡区两类. 我们主要讨论近平衡区的非平衡态，近平衡区热力学又称为**线性热力学**.

一般来说，弛豫时间与系统的大小有关，尺寸越大的系统，弛豫时间越长，这是容易想像的. 所以一个处于非平衡状态的宏观系统，特别在近平衡区，如果把它划分成许多小部分来研究，只要：①每个小部分足够大，远大于分子的平均自由程，使宏观的热力学方法仍然适用；②每个小部分的弛豫时间足够短，远小于整个系统的弛豫时间，那么在研究整个非平衡系统的性质时，可以把每个小部分看作已达到平衡状态——称为**局部平衡**——来处理. 每个小部分处于局部平衡，它有一定的温度、内能、熵、化学势等，每个小部分的变化是可逆的，故可对每个小部分应用热力学第一定律

$$T\mathrm{d}s = \mathrm{d}u - \mu\,\mathrm{d}n \tag{19.4.1}$$

式中 s、u 和 n 分别为每个小部分的熵密度、内能密度和粒子数密度. 上式中，忽略了元功项 $p\mathrm{d}v$，因为我们假定每个小部分体积很小，体积变化可忽略（注意：对流体力学问题，该项一般不能忽略）. 另一方面，假定每个小部分只通过表面与周围发生作用，表面效应足够小，使整个系统的内能和熵仍具有可加性，即

$$U = \int u\,\mathrm{d}\tau;\quad S = \int s\,\mathrm{d}\tau \tag{19.4.2}$$

在系统内取体积 V（注意：不是整个系统的体积），其面积为 σ. 体积 V 内熵变化率应该等于通过表面流出的熵与 V 内产生的熵之和，即

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V s\,\mathrm{d}\tau = \int_V \frac{\partial s}{\partial t}\mathrm{d}\tau = -\oint_\sigma \boldsymbol{J}_S\cdot \boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\sigma + \int_V \Theta\,\mathrm{d}\tau \tag{19.4.3}$$

其中 $\boldsymbol{J}_S$ 为熵流密度矢量，Θ 为局部熵产生率. 上式的微分形式为

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_S + \Theta \tag{19.4.4}$$

上式只是一种形式表示，对具体的不可逆过程可以求得熵流密度矢量和局部熵产生率的表达式. 仅介绍两个例子.

1. 热传导过程：当物体的温度不均匀时，物体内部将发生热传导过程. 首先考虑单纯的热传导过程，取物体内的一个体积元，体积元内能的减少是热量流出的结果，即

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_\mathrm{r} \tag{19.4.5}$$

其中 $\boldsymbol{J}_\mathrm{r}$ 是热流密度矢量. 另一方面，体积元处于局部平衡状态，即 $T\mathrm{d}s=\mathrm{d}u$. 注意：此式仅考虑单纯的热传导过程而没有质量交换. 于是局部熵密度的变化率为

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial t} \tag{19.4.6}$$

方程(19.4.5)代入上式得到

$$\frac{\partial s}{\partial t}=-\frac{1}{T}\nabla\cdot\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}=-\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}}{T}-\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\nabla\frac{1}{T}\right) \tag{19.4.7}$$

上式表明,局部熵密度的变化有两部分:第一项是由于热量从体积元流出而引起的局部熵密度增加;第二项是由于体积元中温度梯度导致的热传导过程所引起的局部熵密度的产生.比较方程(19.4.4),可得到

$$\boldsymbol{J}_S=\frac{\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}}{T};\quad \Theta=\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\nabla\frac{1}{T} \tag{19.4.8}$$

定义**热流动力**

$$\boldsymbol{X}_{\mathrm{r}}=\nabla\frac{1}{T} \tag{19.4.9}$$

由于温度的不均匀导致了不可逆的热传导过程,故称 $\boldsymbol{X}_{\mathrm{r}}$ 为"动力".于是局部熵产生率可表示为

$$\Theta=\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\boldsymbol{X}_{\mathrm{r}} \tag{19.4.10}$$

由热传导的 Fourier 定律:$\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}=-\kappa\nabla T$,故

$$\Theta=\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\boldsymbol{X}_{\mathrm{r}}=\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\nabla\frac{1}{T}=-\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\frac{\nabla T}{T}=\kappa\frac{(\nabla T)}{T}\geqslant 0 \tag{19.4.11}$$

由于热导系数 $\kappa>0$,故局部熵产生率恒正.

2. 热传导与物质输运同时存在的过程:如果系统内部不仅存在温度不均匀,化学势也不均匀,则热传导和物质输运过程同时存在.取系统内的一个体积元,因同时存在热传导和物质输运,方程(19.4.5)变成

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{J}=0 \tag{19.4.12}$$

其中 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}+\mu\boldsymbol{J}_n$,$\boldsymbol{J}_n$ 为粒子流密度矢量.假定粒子数守恒,即

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{J}_n=0 \tag{19.4.13}$$

由方程(19.4.1)

$$\frac{\partial s}{\partial t}=\frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\mu}{T}\frac{\partial n}{\partial t} \tag{19.4.14}$$

把方程(19.4.12)和(19.4.13)代入上式得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial s}{\partial t}&=-\frac{1}{T}\nabla\cdot\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}-\frac{1}{T}\nabla\cdot(\mu\boldsymbol{J}_n)+\frac{\mu}{T}\nabla\cdot\boldsymbol{J}_n\\&=-\nabla\cdot\left(\frac{\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}}{T}\right)+\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\nabla\frac{1}{T}-\boldsymbol{J}_n\cdot\frac{\nabla\mu}{T}\end{aligned} \tag{19.4.15}$$

比较方程(19.4.4)可得到

$$\boldsymbol{J}_S=\frac{\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}}{T};\quad \Theta=\boldsymbol{J}_{\mathrm{r}}\cdot\nabla\frac{1}{T}-\boldsymbol{J}_n\cdot\frac{\nabla\mu}{T} \tag{19.4.16}$$

定义**粒子流动力**

$$\boldsymbol{X}_n = -\frac{\nabla\mu}{T} \tag{19.4.17}$$

相应地，方程(19.4.16)第二式变成

$$\Theta = \boldsymbol{J}_r \cdot \boldsymbol{X}_r + \boldsymbol{J}_n \cdot \boldsymbol{X}_n \tag{19.4.18}$$

从(19.4.18)式可见，如果同时存在多个不可逆过程，那么局部熵产生率可表示为"流"矢量和"力"矢量的双线性形式

$$\Theta = \sum_k \boldsymbol{J}_k \cdot \boldsymbol{X}_k \tag{19.4.19}$$

"流"矢量又可用"力"矢量表示：热传导过程中 $\boldsymbol{J}_r = -\kappa\nabla T \sim \boldsymbol{X}_r$，扩散过程中 $\boldsymbol{J}_n = -D\nabla n \sim \nabla\mu \sim \boldsymbol{X}_n$，即一般可以写成

$$\boldsymbol{J} = L\boldsymbol{X} \tag{19.4.20}$$

这些规律都是实验总结出来的. 但是当系统中同时存在几种流和几种力时，将出现不同过程的交叉现象. 例如，当温度梯度和浓度梯度同时存在时，温度梯度与浓度梯度都会引起热流，也都会引起粒子流. 所以"流"矢量与"力"矢量的一般关系可写为

$$\boldsymbol{J}_k = \sum_l L_{kl} \boldsymbol{X}_l \tag{19.4.21}$$

系数 L_{kl} 等于一个单位的第 l 种"力"引起的第 k 种"流"，称为**动理系数**. 上式表示线性过程. 如果非平衡远离近平衡区，那么"流"矢量是"力"矢量的函数，可以在"力"矢量的零点作展开

$$\boldsymbol{J}_k(\{\boldsymbol{X}_l\}) = \boldsymbol{J}_k(0) + \sum_l \left(\frac{\partial \boldsymbol{J}_k}{\partial \boldsymbol{X}_l}\right)_0 \boldsymbol{X}_l + \frac{1}{2}\sum_{l,m}\left(\frac{\partial^2 \boldsymbol{J}_k}{\partial \boldsymbol{X}_l \partial \boldsymbol{X}_m}\right)_0 \boldsymbol{X}_l \boldsymbol{X}_m + \cdots$$

当"力"矢量为零时，"流"矢量也为零 $\boldsymbol{J}_k(0)=0$，故

$$\boldsymbol{J}_k(\{\boldsymbol{X}_l\}) = \sum_l L_{kl} \boldsymbol{X}_l + \frac{1}{2}\sum_{l,m} L_{klm} \boldsymbol{X}_l \boldsymbol{X}_m + \cdots \tag{19.4.22}$$

其中动理系数和二阶动理系数分别定义为

$$L_{kl} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{J}_k}{\partial \boldsymbol{X}_l}\right)_0; \quad L_{klm} = \left(\frac{\partial^2 \boldsymbol{J}_k}{\partial \boldsymbol{X}_l \partial \boldsymbol{X}_m}\right)_0 \tag{19.4.23}$$

动理系数具有对称性，即 $L_{kl} = L_{lk}$，称为 **Onsager 倒易关系**，在热力学里，无法证明这一关系，而在统计物理中可得到证明(具体证明略). 方程(19.4.21)代入式(19.4.19)得到

$$\Theta = \sum_k \sum_l L_{kl} \boldsymbol{X}_l \cdot \boldsymbol{X}_k \tag{19.4.24}$$

因为 $\Theta \geqslant 0$，故要求上式是正定的二次型.

例 19.4.1　温差电现象

解： 将两种不同金属连接，并在两端接头处保持不同的温度，电路中将存在

温度梯度和化学势梯度，因而同时产生热流和粒子流（即电流）. 实验表明，存在上述的交叉现象，即温度梯度不仅产生热流而且同时产生电流，化学势梯度不仅产生电流而且同时产生热流，“流”矢量与“力”矢量的关系为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}_n &= -L_{11}\frac{1}{T}\nabla\mu + L_{12}\nabla\frac{1}{T} \\ \boldsymbol{J}_r &= -L_{12}\frac{1}{T}\nabla\mu + L_{22}\nabla\frac{1}{T} \end{aligned} \tag{19.4.25}$$

最小熵产生定理：最后，我们来证明稳恒的非平衡态（不随时间变化）是一种熵产生率最小的状态. 考虑单纯的热传导过程，由方程(19.4.10)，非平衡系统熵产生率的时间变化为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} &\equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\Theta\mathrm{d}\tau = \int\frac{\partial\Theta}{\partial t}\mathrm{d}\tau = \int\frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{J}_r\cdot\boldsymbol{X}_r)\mathrm{d}\tau \\ &= \int\frac{\partial}{\partial t}\left[L\left(\nabla\frac{1}{T}\right)^2\right]\mathrm{d}\tau = 2\int L\nabla\frac{1}{T}\cdot\nabla\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{T}\right)\mathrm{d}\tau \\ &= 2\int\nabla\cdot\left[\boldsymbol{J}_r\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{T}\right)\right]\mathrm{d}\tau - 2\int\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{T}\right)\nabla\cdot\boldsymbol{J}_r\mathrm{d}\tau \end{aligned} \tag{19.4.26}$$

上式第一项可化成面积分，在边界温度不变的情况下面积分为零，故

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = -2\int\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{T}\right)\nabla\cdot\boldsymbol{J}_r\mathrm{d}\tau \tag{19.4.27}$$

另一方面，在体积变化可忽略时，单位体积的内能为 $\mathrm{d}u=c_v\mathrm{d}T$，结合方程(19.4.5)可得到

$$c_v\frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{J}_r \tag{19.4.28}$$

代入方程(19.4.27)

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = -2\int\frac{c_v}{T^2}\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)^2\mathrm{d}\tau \leqslant 0 \tag{19.4.29}$$

上式表明：如果系统的温度分布随时间变化，热传导过程将使系统的熵产生随时间减小，直到熵产生率达到极小值、系统处于稳恒温度分布的非平衡态. 这一结论称为**最小熵产生定理**.

以上我们讨论了单纯的热传导过程的最小熵产生定理，事实上，对诸如物质输运、电导过程、化学反应等非平衡过程，只要“力”矢量与“流”矢量满足线性关系式(19.4.21)，即在近平衡区，最小熵产生定理均成立. 根据最小熵产生定理，系统处在稳恒的非平衡定态时，即使由于某种外界的扰动或者内部的涨落使系统离开了这一状态，只要扰动或者涨落不大，式(19.4.21)仍然成立，系统会回到熵产生率最小的稳恒非平衡定态. 但是，如果当问题涉及到式(19.4.22)中仅保留线性项已不能很好描述系统的非平衡过程时（即远离平衡态），系统的过程进入非线性区，问题将变得十分复杂. 在这种情况下，存在这样的可能：当发生扰动或者涨落时，系统原

来所处的非平衡定态会变得不稳定而演化到另一个新的定态，即发生非平衡相变，出现与原来不同的、新的、有序的组织结构.

我们不进行这方面的深入讨论，仅举一例说明. 考虑两块平行板之间液体中的温度场分布问题，如果保持上下板的温差 ΔT 比较小时，两平行板之间可以存在稳定的温度梯度分布（稳恒非平衡定态）. 当 ΔT 增加时，温度梯度也增加. 但当 ΔT 增加到某一个临界值时，温度梯度不再稳定，只要有少许的扰动，状态将发生大的、有限的突变，此时液体发生有规律的对流传热. 因为此时液体通过原来的热传导传热（线性区！）已不能充分传输热流以保持系统处于稳恒的非平衡态了，某些局部区域发生能量积累，温度不断上升，体积不断膨胀，出现越来越大的密度梯度，从而导致了新的耗散机理——对流的产生.

习　题　19

19.1　函数 $z=z(x,y)$ 可用隐函数的形式给出

$$F(x,y,z)=0$$

证明关系

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y=\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y^{-1};\quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_z\left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x=-1$$

（提示：求全微分

$$\mathrm{d}F=\frac{\partial F}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial F}{\partial y}\mathrm{d}y+\frac{\partial F}{\partial z}\mathrm{d}z=0$$

令 $\mathrm{d}y=0$ 得到

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y=\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_{y,z}\left(\frac{\partial F}{\partial z}\right)_{x,y}^{-1};\quad \left(\frac{\partial x}{\partial z}\right)_y=\left(\frac{\partial F}{\partial z}\right)_{x,y}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_{y,z}^{-1}$$

令 $\mathrm{d}x=0$ 和 $\mathrm{d}z=0$ 可得到类似的关系）

19.2　证明热力学关系

$$C_p-C_V=\left[p+\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T\right]\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p=T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

（提示：由 $H=U+pV$，等压过程中

$$C_p=\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_p+p\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

取 $U=U(T,V)=U[T,V(T,p)]$；又

$$\mathrm{d}U=T\mathrm{d}S-p\mathrm{d}V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V\mathrm{d}T+\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T\mathrm{d}V$$

$$\mathrm{d}S=\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V\mathrm{d}T+\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T\mathrm{d}V$$

故

$$dU= T\left[\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dT+\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T dV\right]- p dV$$

$$= \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT+\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T dV = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dT+\left[T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T - p\right]dV$$

即

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T - p$$

由第 20 章式(20.3.33)得到

$$p+\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V)$$

19.3　求理想气体在绝热过程中的状态方程.(提示:绝热过程中

$$\bar{d}Q = dU + pdV = 0$$

即

$$dU + pdV = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT+\left[\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T + p\right]dV = 0$$

由上题

$$C_V dT + \frac{C_p - C_V}{\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p} dV = 0$$

令 $\gamma=C_p/C_V=$常数,且由理想气体的状态方程,最后得到

$$\int \frac{1}{\gamma-1}\frac{dT}{T}+\frac{dV}{V} = 0)$$

答案:$TV^{\gamma-1}=C_1$;$pV^{\gamma}=C_2$.

19.4　已测得顺磁物质磁场 H 和磁化强度 m 随温度的变化关系为

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_m = \frac{H}{T};\quad \left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_H =-\frac{CH}{T^2}$$

其中 C 为常数,求顺磁物质的状态方程 $m=m(T,H)$.(提示

$$dm= \left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_H dT+\left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_T dH$$

$$= \left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_H dT-\left(\frac{\partial m}{\partial T}\right)_H\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_m dH$$

注意利用习题 19.1 中的关系)

答案:$m=CH/T$,对顺磁物质,当 $H=0$ 时,$m=0$,故积分常数为零.

19.5　两相同体积的水,温度分别为 T_1 和 T_2,在等压条件下把它们混合,求熵的变化,假定在温度变化范围内 C_p 为常量.(提示

$$dS = \frac{dU + pdV}{T} = \frac{dH}{T} = \frac{C_p dT}{T}$$

混合后的温度为 $T=(T_1+T_2)/2$，分别求熵的变化，然后相加）

答案：$\Delta S=\Delta S_1+\Delta S_2=C_p\ln\dfrac{(T_1+T_2)^2}{4T_1T_2}$.

19.6　一蒸汽机工作于 400℃的高温热源与 150℃的低温热源之间，对给定的热输入 Q，此蒸汽机所做的最大功是多少？在什么条件下得到此最大功？（提示：由

$$\frac{Q_1}{T_1}-\frac{Q_2}{T_2}\leqslant 0$$

得到功为

$$W=Q_1-Q_2\leqslant\left(1-\frac{T_2}{T_1}\right)Q_1=\left(1-\frac{T_2}{T_1}\right)Q)$$

答案：$W=0.37Q$，可逆循环得到最大功.

19.7　有两个全同物体，其内能为 $U=aT$（a 为常量），初始温度分别为 T_{01} 和 T_{02}. 现在以两物体为高低温热源驱动一可逆 Carnot 热机，最后两物体达到一共同的温度 T_f.（1）求 T_f；（2）求 Carnot 热机所做的功.（提示：假定物体体积不变

$$dQ_i=dU_i=a\,dT_i\quad(i=1,2),\qquad W=(U_1-U)-(U-U_2))$$

答案：（1）$T_f=\sqrt{T_{01}T_{02}}$；　（2）$W=U_1+U_2-2U=a(T_{01}+T_{02}-2T_f)$.

19.8　两个温度分别为 T_1 和 T_2（$T_1>T_2$）的物体，它们的定压热容量 C_1 和 C_2 为常量，设在外界压强保持不变情况下，一热机工作在两物体之间，求热机所能输出的最大功.（提示：可逆 Carnot 热机工作至两物体温度相等时输出功最大. 物体 1 和 2 的熵变化

$$\Delta S_\nu=C_\nu\ln\frac{T_f}{T_\nu}\quad(\nu=1,2)$$

热机的熵变为零，物体 1、2 和热机构成绝热系统，总熵变 $\Delta S\geqslant 0$，由此求出最后温度）

答案：输出功为

$$W=Q_1-Q_2=C_1(T_1-T_f)-C_2(T_f-T_2).$$

19.9　有两个全同物体，热容量为常量，初始温度为 T_i. 一致冷机在两物体间工作，使其中一个物体的温度降到 T_h 为止. 假设物体维持在定压，并且不发生相变（见第 20 章讨论）. 用熵增加原理证明此过程所需的最小功为

$$W_{\min}=C_p\left(\frac{T_i^2}{T_h}+T_h-2T_i\right)$$

（提示：设物体 1 终态温度为 T_1，它吸收热量 $Q_1=C_p(T_1-T_i)$，熵的变化为

$$\Delta S_1=\int_{T_i}^{T_1}C_p\frac{dT}{T}=C_p\ln\frac{T_1}{T_i}$$

物体 2 放出热量 $Q_2=C_p(T_i-T_h)$，熵的变化为

$$\Delta S_2=\int_{T_i}^{T_h}C_p\frac{dT}{T}=C_p\ln\frac{T_h}{T_i}$$

致冷机 3 工作若干循环后回到初态，熵和内能不变：$\Delta S_3=0$ 和 $\Delta U_3=0$；物体 1、物体 2 和致冷机 3 构成绝热系统，总熵变化

$$\Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2 + \Delta S_3 \geqslant 0$$

由热力学第一定律，外界对系统做的功为：$W=Q_1-Q_2$）

19.10 一个系统由两块物体和一个热源组成. 两块物体的质量分别为 m_1 和 m_2，温度各为 T_1 和 T_2，它们的比热容（即单位质量的热容量）都为 c. 热源的温度为 T_0. 现有一个可逆 Carnot 热机工作在这一系统，当热机工作到尽头，求热机输出的总功 W 和热源吸收的热量 Q.（提示：当热机工作到两物体的温度与热源温度相同时，热机停止工作；热机、热源、物体 1 和物体 2 构成可逆绝热系统，总熵变化为零；热机的熵变化为零，热源的熵变化为 $\Delta S_0=Q/T_0$（Q 为热源吸收的总热量），两物体的熵变化为

$$\Delta S_\nu = cm_\nu \ln\frac{T_0}{T_\nu} \quad (\nu=1,2)$$

可求出 Q，$W=Q_1+Q_2-Q$，其中 $Q_\nu(\nu=1,2)$ 分别是热机从物体 1 和物体 2 吸收的热量）

答案：$W=m_1c(T_1-T_0)+m_2c(T_2-T_0)-cT_0\left(m_1\ln\dfrac{T_1}{T_0}+m_2\ln\dfrac{T_2}{T_0}\right)$

$$Q = cT_0\left(m_1\ln\frac{T_1}{T_0}+m_2\ln\frac{T_2}{T_0}\right).$$

19.11 一个定压热容量 C 为常数、温度为 $T_{\rm i}$ 的物体，与温度为 $T_{\rm h}$ 的热源在定压下接触达到热平衡，求总的熵变化，并证明总熵变大于零.（提示：物体熵变

$$\Delta S_1 = C\ln\frac{T_{\rm h}}{T_{\rm i}}$$

热源熵变化 $\Delta S_2=\Delta Q/T_{\rm h}=C(T_{\rm i}-T_{\rm h})/T_{\rm h}$，总的熵变为 $\Delta S=\Delta S_1+\Delta S_2$. 利用 $x>0$ 时，函数 $f(x)=x-1-\ln x>0$）

答案：$\Delta S=C\left(\dfrac{T_{\rm i}}{T_{\rm h}}-1+\ln\dfrac{T_{\rm h}}{T_{\rm i}}\right)$.

19.12 在一个较大的温度范围，固体的物态方程可表示为

$$V = V_0(1+3\alpha T-\kappa p)$$

式中 α 为线膨胀系数，κ 为等温压缩系数，若 α、κ、V_0 和 C_V 均为常量. 证明

(1) $U=U_0+C_V(T-T_0)+\dfrac{1}{2\kappa V_0}(V-V_0)^2$

(2) $S=S_0+C_V\ln\dfrac{T}{T_0}+\dfrac{3\alpha}{\kappa}(V-V_0)$；　(3) $C_p-C_V=\dfrac{9\alpha^2TV_0}{\kappa}$

（提示：(1) 选 T 和 V 为独立变量，由第 20 章的热力学关系式(20.3.34)

$$T\mathrm{d}S = C_V\mathrm{d}T + T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\mathrm{d}V$$

故

$$dU = TdS - pdV = C_V dT + \left[T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p\right]dV$$

(2) 由第 20 章的热力学关系式(20.3.33)

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T dV = \frac{C_V}{T}dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V dV$$

(3) 由习题 19.2 的热力学关系式

$$C_p - C_V = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p)$$

第 20 章　热力学平衡条件、热力学函数和相变

根据热力学第二定律，孤立系统中发生的任何宏观过程，包括趋向平衡的过程，都朝着使系统的熵增加的方向进行. 如果孤立系统已经达到了熵极大的状态，就不可能再发生任何宏观的变化，系统就达到了平衡态. 为了判定孤立系统的某一状态是否为平衡态，可以设想系统围绕该状态发生各种可能的虚变动(当然虚变动必须满足约束条件)，而比较由此引起的熵变化. 孤立系统与外界既没有能量的交换，也没有功的交换，更没有物质的交换. 对非孤立系统，一般把所研究的系统与外界媒质合成一个大系统，而这个大系统可看成是孤立系统，然后利用孤立系统的熵增加原理. 由此可导出不同条件下系统的特征函数，当系统达到平衡时，相应的特征函数取极值.

20.1　系统平衡条件，自由能、热力势和广势函数

孤立系统：首先考虑孤立系统的平衡条件. 如前所述，系统的平衡态完全由外参量和一个内参量(取为温度)确定. 当系统达到平衡态时，它的熵达到极大值，其他内参量(除温度以外)将取特定值且可表示成外参量和温度的函数. 当内参量有任何偏离都对应于某个非平衡态，相应的熵减小，即

$$\Delta S = \delta S + \delta^2 S < 0 \tag{20.1.1}$$

或者

$$\delta S = 0; \quad \delta^2 S < 0 \tag{20.1.2}$$

上式中第一式称为**极值条件**，第二式称为**稳定条件**. 当系统达到平衡态，内参量和外参量的变动源于涨落，但热力学不考虑涨落，故这里的“变动”是虚拟的对平衡态的偏离. 热力学第一定律为

$$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S + \sum_i Y_i \mathrm{d}y_i + \mu \mathrm{d}n \tag{20.1.3}$$

考虑简单的 p-V 系统，系统的体积 V、内能 U 和总摩尔数 n 都不变. 将它划分为两个子系统 V_1 和 V_2，相应的内能和摩尔数分别为(U_1, U_2)和(n_1, n_2)，注意：两个子系统也可看作两个不同的相，如固相和液相. 整个系统是孤立系统，显然有约束条件

$$V = V_1 + V_2; \quad n = n_1 + n_2; \quad U = U_1 + U_2 \tag{20.1.4}$$

整个系统的熵为

$$S = S_1(U_1, V_1, n_1) + S_2(U_2, V_2, n_2) \tag{20.1.5}$$

在平衡态附近作无限小变动，那么约束条件变成

$$\delta V_1 + \delta V_2 = 0; \quad \delta n_1 + \delta n_2 = 0; \quad \delta U_1 + \delta U_2 = 0 \tag{20.1.6}$$

熵偏离的一阶变分为

$$\begin{aligned}\delta S = \delta S_1 + \delta S_2 &= \left(\frac{\partial S_1}{\partial U_1}\delta U_1 + \frac{\partial S_1}{\partial V_1}\delta V_1 + \frac{\partial S_1}{\partial n_1}\delta n_1\right) \\ &+ \left(\frac{\partial S_2}{\partial U_2}\delta U_2 + \frac{\partial S_2}{\partial V_2}\delta V_2 + \frac{\partial S_2}{\partial n_2}\delta n_2\right)\end{aligned} \tag{20.1.7}$$

上式所有的偏导数在平衡态取值. 对每个子系统应用第一定律式(20.1.3)

$$T_i \mathrm{d}S_i = \mathrm{d}U_i + p_i \mathrm{d}V_i - \mu_i \mathrm{d}n_i \quad (i = 1, 2) \tag{20.1.8}$$

因熵是态函数，$\mathrm{d}S_i$ 是全微分，于是

$$\left(\frac{\partial S_i}{\partial U_i}\right)_{V_i, n_i} = \frac{1}{T_i}; \quad \left(\frac{\partial S_i}{\partial V_i}\right)_{U_i, n_i} = \frac{p_i}{T_i}; \quad \left(\frac{\partial S_i}{\partial n_i}\right)_{U_i, V_i} = -\frac{\mu_i}{T_i} \tag{20.1.9}$$

代入方程(20.1.7)且利用式(20.1.6)得到

$$\delta S = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\delta U_1 + \left(\frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2}\right)\delta V_1 - \left(\frac{\mu_1}{T_1} - \frac{\mu_2}{T_2}\right)\delta n_1 \tag{20.1.10}$$

因为 δU_1、δV_1 和 δn_1 都是独立变分，由 $\delta S=0$ 得到

$$T_1 = T_2; \quad p_1 = p_2; \quad \mu_1 = \mu_2 \tag{20.1.11}$$

上式表明：系统平衡时，系统内任意两部分的温度、压强和化学势必须相等. 如果系统已处于热平衡($T_1 = T_2$)和力平衡($p_1 = p_2$)，但化学势并不相等，那么系统仍然处于不平衡态，状态要发生变化，结果使熵增加(这是真实的增加)

$$\mathrm{d}S = \frac{1}{T}(\mu_2 - \mu_1)\delta n_1 > 0 \tag{20.1.12}$$

说明($\mu_2 - \mu_1$)与 δn_1 同号，其物理意义为：粒子将从化学势高的部分流向化学势低的部分. 因此化学势是促使粒子流动的势.

对粒子数不守恒的系统(如光子系统)，没有约束条件 $\delta n_1 + \delta n_2 = 0$，于是 δn_1 与 δn_2 都是独立变分，故式(20.1.10)变成

$$\delta S = \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)\delta U_1 + \left(\frac{p_1}{T_1} - \frac{p_2}{T_2}\right)\delta V_1 - \frac{\mu_1}{T_1}\delta n_1 - \frac{\mu_2}{T_2}\delta n_2 \tag{20.1.13}$$

由 $\delta S=0$ 得到平衡条件为

$$T_1 = T_2; \quad p_1 = p_2; \quad \mu_1 = \mu_2 = 0 \tag{20.1.14}$$

所以**总粒子数不守恒的孤立系统处于平衡时，化学势为零.**

非孤立系统：其次来考虑非孤立系统的平衡条件. 实际的孤立系统是不存在的，因此需要寻求与外界媒质相互作用的非孤立系统的极值条件. 设外界媒质足够大，在与系统相互作用过程中保持恒定的温度 T_0、压强 p_0 和化学势 μ_0. 另外，可以

把外界媒质的变化看作是可逆过程. 系统本身是非孤立的,但是可以把系统和外界媒质组成一个大系统,这个大系统可看作孤立系统,可以用平衡态熵极大条件

$$\Delta S_{总} = \Delta S + \Delta S_0 < 0 \tag{20.1.15}$$

其中 ΔS_0 是外界媒质的熵变. 如果外界媒质传给系统的热量为 ΔQ,那么外界媒质的熵变为

$$\Delta S_0 = -\frac{\Delta Q}{T_0} \tag{20.1.16}$$

如果外界媒质对系统作的功为 ΔW,输入系统的摩尔数为 Δn,则对系统运用第一定律

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W + \mu_0 \Delta n \tag{20.1.17}$$

结合上式和式(20.1.16),方程(20.1.15)变成

$$\Delta S - \frac{\Delta U - \Delta W - \mu_0 \Delta n}{T_0} < 0 \tag{20.1.18}$$

或者

$$\Delta(U - T_0 S - \mu_0 n) - \Delta W > 0 \tag{20.1.19}$$

这就是适用于非孤立系统的一般条件. 对简单的 p-V 系统,$\Delta W = -p_0 \Delta V$,上式变成

$$\Delta(U + p_0 V - T_0 S - \mu_0 n) > 0 \tag{20.1.20}$$

注意:温度 T_0、压强 p_0 和化学势 μ_0 仍然是外界媒质的参量,一般情况下不等于系统的温度 T、压强 p 和化学势 μ. 所以为了得到关于系统的极值条件,还需要附加其他条件. 下面考虑特殊情况.

1. 系统处于温度、体积和粒子数恒定的条件下且系统的温度等于外界媒质的温度 $T = T_0$,即等温、等体积和等粒子数. 式(20.1.20)简化为

$$\Delta(U - TS) > 0 \tag{20.1.21}$$

注意:上式出现的量都是系统的. 定义新的态函数 F

$$F = U - TS \tag{20.1.22}$$

称为**自由能**. 因此在等温、等体积过程中自由能极小:$\Delta F > 0$,或者写成

$$\delta F = 0; \quad \delta^2 F > 0 \tag{20.1.23}$$

利用式(20.1.22)和热力学第一定律,可以把可逆过程中自由能的变化写成

$$\mathrm{d}F = \mathrm{d}U - T\mathrm{d}S - S\mathrm{d}T = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V + \mu\mathrm{d}n \tag{20.1.24}$$

F 是态函数,以温度 T、体积 V 和摩尔数 n 为独立变量. 因为 $\mathrm{d}F$ 是全微分,故

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,n}; \quad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,n}; \quad \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial n}\right)_{V,T} \tag{20.1.25}$$

可见:化学势 μ 为定温、定容条件下,注入系统 1 摩尔粒子而引起的自由能的增加.

设系统与大的热源相接触,温度恒定为 T. 同样把系统分成二个子系统,约束条件

为

$$\delta V_1 + \delta V_2 = 0; \quad \delta n_1 + \delta n_2 = 0 \tag{20.1.26}$$

显然 F 是广延量,即

$$\delta F = \delta F_1 + \delta F_2 = \left(\frac{\partial F_1}{\partial V_1}\right)\delta V_1 + \left(\frac{\partial F_1}{\partial n_1}\right)\delta n_1 + \left(\frac{\partial F_2}{\partial V_2}\right)\delta V_2 + \left(\frac{\partial F_2}{\partial V_2}\right)\delta V_2$$

由方程(20.1.25)和(20.1.26),上式简化为

$$\delta F = (p_2 - p_1)\delta V_1 + (\mu_1 - \mu_2)\delta n_1 = 0 \tag{20.1.27}$$

故平衡条件为 $p_2 = p_1$ 和 $\mu_1 = \mu_2$,即子系统的压力和化学势相等,而温度相等是初始条件,显然应该满足.

例 20.1.1　液滴的平衡条件.

解:　在得到平衡条件式(20.1.11)时,我们没有考虑子系统 1 和 2 之间的界面,即假定界面是平面.如果不是平面,结果又如何呢?考虑蒸汽中液滴的平衡问题:假定液滴、蒸汽和表面分别为 α、β 和 γ 三个相,那么三个相的第一定律关系为

$$\begin{aligned} dU^\alpha &= T^\alpha dS^\alpha - p^\alpha dV^\alpha + \mu^\alpha dn^\alpha \\ dU^\beta &= T^\beta dS^\beta - p^\beta dV^\beta + \mu^\beta dn^\beta \\ dU^\gamma &= T^\gamma dS^\gamma + \sigma dA \end{aligned} \tag{20.1.28}$$

上式中假定表面相是一个没有厚度的几何面,元功为 $dW = \sigma dA$,其中 σ 为表面张力系数,A 为表面面积.假定温度平衡已达到,用自由能极小求系统的平衡条件.约束条件为

$$\delta n^\alpha + \delta n^\beta = 0; \quad \delta V^\alpha + \delta V^\beta = 0 \tag{20.1.29}$$

每个相的自由能变分为

$$\begin{aligned} \delta F^\alpha &= -p^\alpha \delta V^\alpha + \mu^\alpha \delta n^\alpha \\ \delta F^\beta &= -p^\beta \delta V^\beta + \mu^\beta \delta n^\beta \\ \delta F^\gamma &= \sigma \delta A \end{aligned} \tag{20.1.30a}$$

系统总自由能的一阶变分为

$$\begin{aligned} \delta F &= \delta F^\alpha + \delta F^\beta + \delta F^\gamma \\ &= -(p^\alpha - p^\beta)\delta V^\alpha + (\mu^\alpha - \mu^\beta)\delta n^\alpha + \sigma \delta A \end{aligned} \tag{20.1.30b}$$

其中已利用了约束条件式(20.1.29).假定液滴是球形的

$$V^\alpha = \frac{4\pi}{3} r^3; \quad A = 4\pi r^2 \tag{20.1.31}$$

于是,方程(20.1.30b)变成

$$\delta F = -\left(p^\alpha - p^\beta - \frac{2\sigma}{r}\right)\delta V^\alpha + (\mu^\alpha - \mu^\beta)\delta n^\alpha \tag{20.1.32}$$

由平衡态自由能极小 $\delta F = 0$ 得到

$$p^\alpha = p^\beta + \frac{2\sigma}{r}; \quad \mu^\alpha = \mu^\beta \tag{20.1.33}$$

显然第一式为力平衡条件:由于表面张力有使液滴收缩的趋势,液滴的压强必须大于蒸汽的压强才能维持力学平衡;第二式为相平衡条件.

2. 系统处于温度、压强和粒子数恒定的条件下且系统的温度和压强等于外界媒质的温度和压强:$T=T_0$ 和 $p=p_0$. 方程(20.1.20)变成

$$\Delta(U+pV-TS)>0 \tag{20.1.34}$$

(20.1.34)式中所有的量都是系统的. 定义新的态函数 G

$$G=U+pV-TS \tag{20.1.35}$$

G 称为**热力势**. 因此在定温、定压条件下,系统平衡条件为热力势极小 $\Delta G>0$,或者

$$\delta G=0;\quad \delta^2 G>0 \tag{20.1.36}$$

可逆过程中热力势的变化

$$dG=-SdT+Vdp+\mu dn \tag{20.1.37}$$

G 是态函数,以温度 T、压强 p 和摩尔数 n 为独立变量. 因为 dG 是全微分,故

$$S=-\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,n};\quad V=\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,n};\quad \mu=\left(\frac{\partial G}{\partial n}\right)_{p,T} \tag{20.1.38}$$

热力势的平衡条件给出化学势相等的条件:$\mu_1=\mu_2$.

3. 系统处于温度、体积和化学势恒定的条件下且系统的温度和化学势等于外界媒质的温度和化学势:$T=T_0$ 和 $\mu=\mu_0$. 方程(20.1.20)变成

$$\Delta(U-TS-\mu n)>0 \tag{20.1.39}$$

由于粒子数不恒定,系统是一个开系. 上式中所有的量都是系统的. 定义新的态函数 Ω

$$\Omega=U-TS-\mu n \tag{20.1.40}$$

Ω 称为**开系的广势函数**. 因此定温、定容和定化学势条件下,系统平衡条件为广势函数极小 $\Delta\Omega>0$,或者

$$\delta\Omega=0;\quad \delta^2\Omega>0 \tag{20.1.41}$$

可逆过程中广势函数的变化为

$$d\Omega=-SdT-pdV-nd\mu \tag{20.1.42}$$

同样可得与式(20.1.38)类似的关系式.

4. 系统处于定容、定熵和定粒子数的条件下,方程(20.1.20)变成:$\Delta U>0$,或者

$$\delta U=0;\quad \delta^2 U>0 \tag{20.1.43}$$

即内能达到极小,这是力学中机械能极小和稳定性条件的推广.

5. 系统处于定温和定粒子数的条件下,$\Delta T=0$,$\Delta n=0$. 方程(20.1.20)变成

$$\Delta F+p_0\Delta V>0 \tag{20.1.44}$$

这种情况不能写成系统态函数的极值条件.

20.2　平衡的稳定性条件和临界态的基本特征

以上只用了系统平衡的极值条件，下面讨论系统平衡的稳定性条件，看看能得到什么结果．考虑简单的 p-V 系统且粒子数固定（$\delta n=0$），以 S 和 V 为独立变量，内能的变化为

$$\Delta U=\delta U+\delta^2 U \tag{20.2.1}$$

其中一阶和二阶变分分别为

$$\delta U=U_S\delta S+U_V\delta V=T\delta S-p\delta V \tag{20.2.2}$$

$$\delta^2 U=\frac{1}{2}\left[U_{SS}(\delta S)^2+2U_{SV}\partial S\partial V+U_{VV}(\delta V)^2\right] \tag{20.2.3}$$

其中为了方便定义

$$\begin{gathered}U_S\equiv\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V=T;\quad U_V\equiv\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S=-p\\ U_{SS}\equiv\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_V;\quad U_{SV}\equiv\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S\partial V}\right)_{S,V};\quad U_{VV}\equiv\left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_S\end{gathered} \tag{20.2.4}$$

把式(20.2.2)、(20.2.3)和(20.2.4)代入方程(20.2.1)得到极值条件和稳定性条件

$$(T-T_0)\delta S-(p-p_0)\delta V=0 \tag{20.2.5}$$

$$\delta^2 U=\frac{1}{2}\left[U_{SS}(\delta S)^2+2U_{SV}\delta S\delta V+U_{VV}(\delta V)^2\right]>0 \tag{20.2.6}$$

方程(20.2.5)给出 $T=T_0$；$p=p_0$，即系统平衡条件为：系统与外界媒质应处于热平衡和力平衡．因为 $T=U_S$，故 $\delta T=U_{SS}\delta S+U_{SV}\delta V$，代入式(20.2.6)消去 δS 得到

$$\delta^2 U=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{U_{SS}}(\delta T)^2+\left(U_{VV}-\frac{U_{SV}^2}{U_{SS}}\right)(\delta V)^2\right]>0 \tag{20.2.7}$$

上式恒成立的条件为

$$U_{SS}=\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V>0;\quad\left(U_{VV}-\frac{U_{SV}^2}{U_{SS}}\right)>0 \tag{20.2.8}$$

根据定容热容量 C_V 的定义

$$C_V=\left(\frac{\bar{d}Q}{dT}\right)_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V=\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$$

注意：上式都是在定容条件下的运算．故式(20.2.8)第一式相当于

$$U_{SS}=\frac{T}{C_V}>0 \tag{20.2.9}$$

即 $C_V>0$，这是不难想像的，系统吸收热量后，温度上升而与外界达到新的热平衡．利用微分关系 $dF=-SdT-pdV$ 和 $dU=TdS-pdV$，显然有关系

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S \tag{20.2.10a}$$

上式右边内能是 S 和 V 的函数，而 S 又可看成 T 和 V 的函数，故

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_S + \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S}\right)_{S,V}\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = U_{VV} + U_{VS}\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \tag{20.2.10b}$$

而由关系 $\delta T = U_{SS}\delta S + U_{SV}\delta V$，得到

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\frac{U_{SV}}{U_{SS}} \tag{20.2.10c}$$

代入式(20.2.10b)得到

$$F_{VV} \equiv \left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = U_{VV} - \frac{U_{SV}^2}{U_{SS}} \tag{20.2.11}$$

所以方程(20.2.8)第二式变为

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2}\right)_T = -\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T > 0 \tag{20.2.12}$$

根据等温压缩系数的定义

$$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \tag{20.2.13}$$

故式(20.2.12)要求 $\kappa_T > 0$. 这也是不难理解的，系统受压后，体积必须变小. 所以稳定平衡的条件为 $\kappa_T > 0$ 和 $C_V > 0$. 方程(20.2.6)也可化为以 δp 和 δS 为变量，注意到

$$-p = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S = U_V; \quad \delta p = -U_{VV}\delta V - U_{SV}\delta S \tag{20.2.14}$$

代入方程(20.2.6)得到

$$\delta^2 U = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{U_{VV}}(\delta p)^2 + \left(U_{SS} - \frac{U_{SV}^2}{U_{VV}}\right)(\delta S)^2\right] > 0 \tag{20.2.15}$$

另一方面，利用微分关系 $\mathrm{d}H = T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}p$ 和 $\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S - p\mathrm{d}V$，可得到与式(20.2.11)类似的关系

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_p = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V, \quad \left(\frac{\partial^2 H}{\partial S^2}\right)_p = U_{SS} - \frac{U_{SV}^2}{U_{VV}} \tag{20.2.16a}$$

其中用到了热力学关系

$$\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_p = T; \quad H_{SS} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial S^2}\right)_p = \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_p \tag{20.2.16b}$$

以及

$$C_p = \left(\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}T}\right)_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \tag{20.2.16c}$$

于是稳定性条件变为

$$U_{VV}=-\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S=\frac{1}{V\kappa_S}>0;\quad H_{SS}=\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_p=\frac{T}{C_p}>0 \quad (20.2.17)$$

即稳定条件为：绝热压缩数 $\kappa_S>0$ 和定压热容量 $C_p>0$.

一个特殊情况是：如果系统所处的状态出现 $F_{VV}=0$，那么在定温条件下（$\delta T=0$），由式(20.2.7)和(20.2.11)，$\delta^2 U=0$，所以系统的稳定性讨论要展开到更高级项才能讨论，这种状态称为**临界态**. 在定温条件下，由式(20.1.44)

$$F_V\delta V+\frac{1}{2}F_{VV}(\delta V)^2+\frac{1}{3!}F_{VVV}(\delta V)^3+\frac{1}{4!}F_{VVVV}(\delta V)^4\cdots+p_0\delta V>0$$

考虑到现在 $F_{VV}=0$

$$(p_0-p)\delta V-\frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T(\delta V)^3-\frac{1}{4!}\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T(\delta V)^4>0 \quad (20.2.18)$$

上式第一项给出力平衡条件 $p=p_0$，而

$$\frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T(\delta V)^3+\frac{1}{4!}\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T(\delta V)^4<0 \quad (20.2.19)$$

上式恒成立的条件是

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T=0;\quad \left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T<0$$

这就是临界态的基本特征，在 p-V 图的等温线上，表示一个拐点，它的一、二阶导数为零，而三阶导数小于零. 注意：一阶导数等于零即为 $F_{VV}=0$.

20.3　热力学函数、热力学关系和最大功原理

热力学函数 U、F、G、Ω 实际上是独立变量变化后，函数的相应变化. 故可用 Legendre 变换求得. 由第一定律，内能 U 以熵 S、体积 V 和摩尔数 n 为独立变量，即

$$dU=TdS-pdV+\mu dn \quad (20.3.1)$$

通过 Legendre 变换，根据系统经历的不同过程，可以定义不同的状态函数.

1. 上式两边同时减去 d(TS)得到

$$d(U-TS)=-SdT-pdV+\mu dn\equiv dF \quad (20.3.2)$$

其中 F 为自由能函数

$$F=U-TS \quad (20.3.3)$$

为了看清自由能函数的意义，假定系统经历一个等温过程（$T=T_0=$常量），那么 $\Delta F=\Delta(U-TS)=\Delta U-T\Delta S$. 又由式(19.3.16)：$T\Delta S\geqslant\Delta Q$，即 $\Delta F\leqslant\Delta U-\Delta Q$. 另一方面，由第一定律 $\Delta Q+\Delta W=\Delta U$ 得到：$\Delta F\leqslant\Delta W$. 于是

$$-\Delta F\geqslant-\Delta W \quad (20.3.4)$$

上式表明：在等温过程中，系统自由能的减少总是大于系统对外界媒质做的功. 只有在可逆过程中，系统自由能的减少全部用来对外做功. 称为**最大功原理**. 自由能是系统内能的一部分，所以在可逆等温条件下，自由能是内能中具有做功潜力的那一部分.

对简单的 p-V 系统，如果系统不仅温度不变，而且体积也不变($\Delta W=0$)，则

$$\Delta F \leqslant 0 \tag{20.3.5}$$

即在**等温等容过程中，系统的自由能变小**(注意与极值条件相反，因为上式表示实际的过程，而极值条件是虚过程).

2. 式(20.3.1)两边同时加上 $\mathrm{d}(pV)$得到

$$\mathrm{d}(U+pV) = T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}p + \mu\mathrm{d}n \equiv \mathrm{d}H \tag{20.3.6}$$

上式左边即为焓函数 H

$$H = U + pV \tag{20.3.7}$$

考虑一个热力学过程，在过程中保持压强不变，则等压过程中焓的变化为

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V = \Delta Q \tag{20.3.8}$$

即在等压过程中系统从外界吸收的热量等于态函数焓的增加值.

3. 式(20.3.6)两边减去 $\mathrm{d}(TS)$得到

$$\mathrm{d}(U+pV-TS) = -S\mathrm{d}T + V\mathrm{d}p + \mu\mathrm{d}n \equiv \mathrm{d}G \tag{20.3.9}$$

即为热力势 G

$$G = U + pV - TS \tag{20.3.10}$$

对均匀系统 $U=nu$，$V=nv$，$S=ns$，代入上式得到

$$G = n(u + pv - Ts) = n\mu \tag{20.3.11}$$

其中已利用方程(19.3.27). 因此**对均匀系统，化学势等于单位摩尔物质的热力势.**

考虑系统(假定粒子数不变)经历一个等温、等压过程，则过程中

$$\Delta G = \Delta U + p\Delta V - T\Delta S \tag{20.3.12}$$

由式(19.3.16)，$T\Delta S \geqslant \Delta Q$，于是

$$\Delta G \leqslant \Delta U + p\Delta V - \Delta Q \tag{20.3.13}$$

假定外界媒质对系统做功除膨胀功 $p\Delta V$ 外，还存在其他形式的功 $\Delta W'$，即

$$\Delta W = -p\Delta V + \Delta W' \tag{20.3.14}$$

由热力学第一定律 $\Delta Q + \Delta W = \Delta U$ 得

$$\Delta G \leqslant \Delta W + p\Delta V = \Delta W' \tag{20.3.15}$$

即 $-\Delta G \geqslant -\Delta W'$. 故在等温、等压过程中，系统热力势的减少总是大于系统对外界媒质做的非膨胀功. 如果不存在其他形式的非膨胀功，$\Delta G \leqslant 0$. 因此，在**等温等压过程中，系统的热力势变小**.

4. 式(20.3.2)两边减去 $\mathrm{d}(\mu n)$得到

$$\mathrm{d}(U - TS - \mu n) = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V - n\mathrm{d}\mu \equiv \mathrm{d}\Omega \tag{20.3.16}$$

即为开系的广势函数

$$\Omega = U - TS - \mu n \tag{20.3.17}$$

考虑系统经历一个等温、温容和等化学势过程，则过程中

$$\Delta\Omega = \Delta U - T\Delta S - \mu\Delta n \tag{20.3.18a}$$

由式(19.3.16)，$T\Delta S \geqslant \Delta Q$，得到

$$\Delta\Omega \leqslant \Delta U - \Delta Q - \mu\Delta n \tag{20.3.18b}$$

假定外界媒质对系统内能的增加除注入粒子外，还存在其他形式的功 $\Delta W'$，即

$$\Delta W = \mu\Delta n + \Delta W' \tag{20.3.19}$$

由第一定律 $\Delta Q + \Delta W = \Delta U$ 得

$$\Delta\Omega \leqslant \Delta W - \mu\Delta n = \Delta W' \tag{20.3.20}$$

即 $-\Delta\Omega \geqslant -\Delta W'$，故在等温、等容和等化学势过程中，系统广势函数的减少总是大于系统对外界媒质作的功. 如果不存在其他形式的功，$\Delta\Omega \leqslant 0$. 故在**等温等容等化学势过程中，系统的广势函数变小**.

以上我们的讨论以简单的 p-V 系统为主，对其他形式的功，只要写出广义力和相应的广义位移以及元功形式，不难作出推广.

例 20.3.1　单位体积磁介质系统的自由能和热力势.

解：　假定体积变化可忽略，外界对磁介质做元功为 $\mathrm{d}W = H\mathrm{d}B$，在等温可逆过程中

$$\mathrm{d}F = \mathrm{d}W \tag{20.3.21}$$

当磁场从零变到 B，对上式积分得到

$$F(T,B) = F(T,0) + \int_0^B H\mathrm{d}B \tag{20.3.22}$$

其中 $F(T,0)$ 是磁场不存在时系统的自由能，第二项是建立磁场和介质极化所附加的自由能，对各向同性的磁介质 $B = \mu H$，于是

$$\begin{aligned} F(T,B) &= F(T,0) + \frac{1}{\mu}\int_0^B B\mathrm{d}B \\ &= F(T,0) + \frac{1}{2\mu}B^2 = F(T,0) + \frac{1}{2}\mu H^2 \end{aligned} \tag{20.3.23}$$

由式 $G = U - TS + pV = F + pV$ 类比得到

$$G(T,B) = F(T,0) + \frac{1}{2}\mu H^2 - HB = F(T,0) - \frac{1}{2\mu}B^2 \tag{20.3.24}$$

可见在忽略膨胀功时 $G(T,0) = F(T,0)$.

由热力学函数的全微分关系可以导出几个重要的关系：

1. 化学势与系统粒子数的关系：式(20.3.1)中 n 是物质的摩尔数，而 μ 是单位摩尔物质的化学势，但在统计物理中，我们常常用系统的粒子数 N 作为变量，因此定义单个粒子的化学势为 μ'，则式(20.3.1)可改写成

$$dU = TdS - pdV + \mu' dN \tag{20.3.25}$$

$\mu' dN$ 表示增加 dN 个粒子时系统内能的增加. 习惯上,把 μ' 也写成 μ,但要注意:当公式中同时出现 N 和 μ 时,这个 μ 指单个粒子的化学势. 由式(20.3.2)

$$dF = - SdT - pdV + \mu dN \tag{20.3.26}$$

故

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}; \quad p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} \tag{20.3.27}$$

因此

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N} = - \left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{T,V} \tag{20.3.28}$$

而强度量 μ 和 p 只能以关系 N/V 依赖于广延量 V 和 N,于是

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N} = - \frac{N}{V}\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{T,V}; \quad \left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{T,V} = - \frac{V}{N}\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N} \tag{20.3.29}$$

即

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{T,V} = - \left(\frac{V}{N}\right)^2 \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N} = \frac{V}{N^2}\frac{1}{\kappa_T} \tag{20.3.30}$$

上式左边的化学势变化是不可测量的,而右边的等温压缩系数可测量. 另外在统计物理里,可从理论上求出 $\mu(T,V,N)$,从而由上式可以求得压缩系数.

2. 熵和焓函数:把熵看作 V 和 T 的函数 $S=S(T,V)$(假定粒子数不变),则

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T dV \tag{20.3.31}$$

而定容热容量为

$$C_V = \left(\frac{\bar{d}Q}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \tag{20.3.32}$$

又利用 $dF = -SdT - pdV$ 得到

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \tag{20.3.33}$$

故式(20.3.31)变成

$$TdS = C_V dT + T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V dV \tag{20.3.34}$$

如果把熵看作 V 和 p 的函数 $S=S(T,p)$,那么

$$dS = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T dp \tag{20.3.35}$$

而定压热容量

$$C_p = \left(\frac{\bar{d}Q}{dT}\right)_p = \left(\frac{dH}{dT}\right)_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p \tag{20.3.36}$$

又利用 $dG = -SdT + Vdp$(假定粒子数不变)得到

$$-\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{20.3.37}$$

故式(20.3.35)变成

$$\mathrm{d}S = \frac{C_p}{T}\mathrm{d}T - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}p \tag{20.3.38}$$

把上式代入 $\mathrm{d}H = T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}p$(假定粒子数不变)可得到

$$\mathrm{d}H = C_p\mathrm{d}T + \left[V - T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p\right]\mathrm{d}p \tag{20.3.39}$$

方程(20.3.34)、(20.3.38)、和(20.3.39)右边的量实验可测，故可以求得物体的熵和焓函数.

低温的获得：由式(20.3.34)或者(20.3.38)

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\frac{T}{C_V}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V;\quad \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \frac{T}{C_p}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{20.3.40}$$

因在体积一定时，压强增加，系统温度也增加，故$(\partial p/\partial T)_V>0$，而 $C_V>0$，第一式意味着：在绝热过程中，体积膨胀，温度要下降. 利用这一性质，可以达到降温的目的；而第二式右边恒大于零，故必须降压才能降温. 由方程(20.3.39)得到

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H = \frac{1}{C_p}\left[T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p - V\right] \tag{20.3.41}$$

如果上式右边大于零，则在等焓过程，降压就能实现降温. 实验中利用节流过程来实现等焓过程. 所谓**节流过程**就是：在绝热管道中装有孔道很细的多孔塞(或节流阀)，使高压气体通过多孔塞后，因流阻而维持在较低压强. 如图 20.3.1(a)，气体初始压强和体积分别为 p_1 和 V_1，然后移动活塞 A 和 B，使多孔塞两边的压强分别保持在 p_1 和 p_2 且 $p_2<p_1$，如图 20.3.1(b)；直到最后气体全部通过多孔塞，压强和体积分别为p_2和V_2，如图20.3.1(c). 由于过程是绝热的，内能的变化等于外

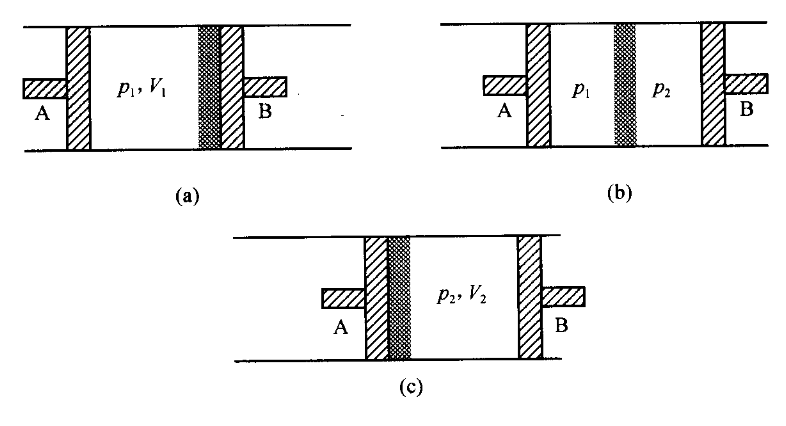


图 20.3.1　节流过程

界做的功，即 $W=U_2-U_1$，在恒压(两边保持压强恒定)条件下，外界对系统做的功为 $W=p_1V_1-p_2V_2$，于是

$$U_1+p_1V_1=U_2+p_2V_2 \tag{20.3.42}$$

而根据焓的定义，上式意味着：$H_1=H_2$，因此节流过程是等焓过程. 由方程(20.3.41)，只要方程右边大于零，则通过节流过程后气体压强下降，温度也下降. 目前结合绝热膨胀法和节流法可得到数 K 的低温.

如果要获得更低的温度(mK 量级)，必须使用所谓的**磁冷却法**. 对磁介质，元功为 $\mathrm{d}W=\mu_0 H\mathrm{d}M$，比较体膨胀元功 $\mathrm{d}W=-p\mathrm{d}V$，显然只要作替换：$V\to M$ 和 $p\to -\mu_0 H$，则式(20.3.40)第二个方程变成

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S=-\frac{\mu_0 T}{C_H}\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \tag{20.3.43}$$

一般，温度增加，磁极化降低，故上式右边大于零. 所以在绝热条件下，磁场减小，则介质的温度降低. 实验中，在等温条件下建立磁场，在绝热条件下撤去磁场，从而使磁介质的温度下降.

20.4 相变、临界现象和临界指数

在状态参量(如压强、温度和体积等)连续变化时，系统的热力学性质也将连续变化. 但当状态参量变化到某个值时，如果在这个值前后作稍微的变化，系统的某些物性发生显著的跃变，则我们说在这个状态系统经历了某种“相变”.

最简单的相变是物质有气、液和固三种不同的状态. 图 20.4.1 是物质的相图. 固定恰当的温度 T，连续增加压强 p，物质可从气态转变成液态，再到固态(如图中直虚线). 在压强 p_1 点的上下，物性完全不同(上为液态，下为气态). 当压强恰好是 p_1 时，气-液共存. 气-液、气-固和液-固共存的曲线分别称为汽化曲线、升华曲线和熔解曲线，通称为**相平衡曲线**.

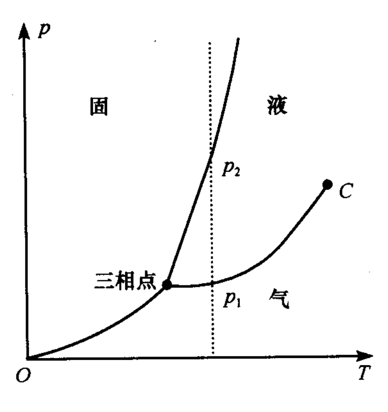


图 20.4.1 物质的相图

图 20.4.1 中有二个特别的点：①汽化曲线、升华曲线和熔解曲线交于一点，在这点，气-液-固三个相共同存在，故称为三相点(纯水的三相点温度为 273.16K)；②汽化曲线终止的点 C，称为**临界点**. 临界点的存在，使我们可以把物质直接从气态转变到液态，而不必经过气-液共存状态.

由 20.1 节讨论结果，气-液平衡的条件为两边化学势相等，即

$$\mu_g(T,p)=\mu_l(T,p) \tag{20.4.1}$$

同样液-固和气-固的平衡方程为

$$\mu_s(T,p) = \mu_l(T,p) \tag{20.4.2}$$

$$\mu_g(T,p) = \mu_s(T,p) \tag{20.4.3}$$

以上三式即为决定汽化曲线、溶解曲线和升华曲线的方程. 在相平衡曲线上，例如在汽化曲线上，保持一定的压强和温度，供给系统一定的热量，那么就有一部分物质从液相转变到气相；

反之，如果此时有一部分物质从气相转变到液相，系统就要放出一定的热量，这个热量称为**汽化潜热**. 同样道理，存在**熔解潜热**和**升华潜热**.

实验发现：如果在等温条件下对纯净的气相慢慢地加压，有时候压强已从相平衡曲线的气相一侧进入液相的一侧，但气体仍没有液化. 这种状态不能维持很久，最终气体将凝结为液体. 这表明越过相平衡曲线的气相是不稳定的，但是可以暂时实现. 这种状态称为**亚稳态**. 在亚稳态，由于外界的扰动或自身的涨落等因素，最终要过渡到稳定态，即液态. 亚稳的气相称为**过冷气体**. 反过来，在等温条件下对纯净的液体慢慢地减压，也会使压强从相平衡曲线的液相一侧进入气相的一侧，而液体仍没有汽化. 这种状态也是亚稳态. 这种液体称为**过热液体**.

下面以汽化曲线为例求相平衡曲线的方程. 设气相和液相的摩尔熵为 s^g 和 s^l，那么汽化潜热为

$$L_{g\to l} = T(s^g - s^l) \tag{20.4.4}$$

另一方面，方程(20.4.1)两边微分得到

$$\left(\frac{\partial \mu_g}{\partial p}\right)_T dp + \left(\frac{\partial \mu_g}{\partial T}\right)_p dT = \left(\frac{\partial \mu_l}{\partial p}\right)_T dp + \left(\frac{\partial \mu_l}{\partial T}\right)_p dT \tag{20.4.5}$$

由式(20.3.11)和(19.3.26)

$$d\mu = du + pdv + vdp - Tds - sdT \tag{20.4.6}$$

即

$$d\mu = -sdT + vdp \tag{20.4.7}$$

于是

$$s = -\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_p, \quad v = \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_p \tag{20.4.8}$$

代入方程(20.4.5)得到

$$\frac{dp}{dT} = \frac{s^g - s^l}{v^g - v^l} = \frac{L_{g\to l}}{T(v^g - v^l)} \tag{20.4.9}$$

(20.4.9)式就是汽化曲线满足的方程. 汽化潜热可由实验测量得到，如果气体和液体的状态方程已知，就可以求得汽化曲线 $p=p(T)$.

由上讨论可见，物质的气-液相变中，在相平衡曲线上化学势相等，但摩尔熵和摩尔体积有突变，而摩尔熵和摩尔体积是化学势的一阶导数. 故可描述成：在相平

衡曲线上，化学势连续，而化学势的一阶导数有突变，这样的相变称为**一级相变**. 根据相变的定义，相变是指当状态参量变化到某个值时，某些物性发生显著的跃变. 物性的跃变不限于摩尔熵和摩尔体积，其他物性包括等温压缩系数、定压比热、定压膨胀系数等，在固体中还包括晶体的对称性，在磁系统中还包括磁化率，等等.

根据化学势的变化情况，可对相变进行分类：如果在相变点，化学势及化学势的一阶导数连续，而二阶导数存在突变，那么称这种相变为**二级相变**；化学势及化学势的一、二阶导数连续，而三阶导数存在突变，那么称这种相变为**三级相变**，如此类推. 这些相变(除一级相变外)通称为**连续相变**.

临界现象：等温压缩系数、定压比热、定压膨胀系数这些量是化学势的二阶导数

$$\kappa_T = -\frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T = -\frac{1}{v}\frac{\partial^2 \mu}{\partial p^2} \tag{20.4.10a}$$

$$c_p = T\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p = -T\frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2} \tag{20.4.10b}$$

$$\alpha_p = \frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{v}\frac{\partial^2 \mu}{\partial T \partial p} \tag{20.4.10c}$$

在连续相变时，这些系数在相变点存在突变(事实上这些系数在连续相变的相变点可能是发散的). 连续相变的相变点称为**临界点**(注意：与图 20.4.1 中的临界点 C 区别). 物质在连续相变临界点的行为称为**临界现象**. 在临界点的邻域，与化学势二阶导数相应的等温压缩系数、定压比热和定压膨胀系数等表现出某种非解析特性，可用幂函数表述这些热力学量在临界点邻域的特性，其幂次(负幂次)称为**临界指数**. 连续相变的例子有：He-4 的 λ 相变，临界温度为 $T_c=2.17\text{K}$(常压下)，液态 He-4 由正常状态转变为超流状态；超导-正常相变(不同的金属有不同的临界温度)；合金的有序-无序相变、铁磁-顺磁相变，等等.

下面以气-液流体和铁磁-顺磁系统为例，介绍实验观察到的临界现象.

1. 在相变点的邻域，物质的等温压缩系数 κ_T

$$\kappa_T = -\frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T \tag{20.4.11}$$

是发散的，意味着：在临界点的邻域，偶然的压强涨落将导致显著的密度涨落. 等压条件下，κ_T 的变化规律为

$$\kappa_T \sim \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{-\gamma} \quad (T \to T_c+0) \tag{20.4.12a}$$

$$\kappa_T \sim \left(\frac{T_c-T}{T_c}\right)^{-\gamma'} \quad (T \to T_c-0) \tag{20.4.12b}$$

临界指数：$\gamma=1.2\sim1.3$，$\gamma'=1.1\sim1.2$.

2. 在相变点的邻域，物质的定容比热 c_v(单位体积的热容量)是发散的，意味

着:在临界点的邻域达到热平衡非常困难,为了使整个系统保持在恒定的温度(如 10^{-2}K)需要很长时间,并要不断搅动液体.等压条件下,c_v 的变化规律为

$$c_v \sim \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{-\alpha} \quad (T \to T_c+0) \tag{20.4.13a}$$

$$c_v \sim \left(\frac{T_c-T}{T_c}\right)^{-\alpha'} \quad (T \to T_c-0) \tag{20.4.13b}$$

临界指数:$\alpha=0.1\sim0.2$,$\alpha'=0.1\sim0.2$.

铁磁物质的特征是在外磁场为零时,物质的磁化强度不为零,称为**自发磁化强度**,自发磁化强度 M 是温度 T 的函数:$M=M(T)$.当温度上升时,M 减小,当温度上升到 T_c(称为**居里温度**)时,自发磁化强度为零,物质转变为顺磁状态.顺磁状态没有自发磁化,但在外磁场作用下可发生磁化.

1. 在相变点的邻域,自发磁化强度 M 的变化规律为

$$M \sim \left(\frac{T_c-T}{T_c}\right)^{-\gamma} \quad (T \to T_c-0) \tag{20.4.14}$$

临界指数:$\gamma=0.30\sim0.36$.

2. 在相变点的邻域,铁磁物质的零磁场比热发散,变化规律为

$$c_H \sim \left(\frac{T-T_c}{T_c}\right)^{-\alpha} \quad (T \to T_c+0) \tag{20.4.15a}$$

$$c_H \sim \left(\frac{T_c-T}{T_c}\right)^{-\alpha'} \quad (T \to T_c-0) \tag{20.4.15b}$$

临界指数:$\alpha=0.0\sim0.2$,$\alpha'=0.0\sim0.2$.

Landau 唯象理论:Landau 在 1937 年提出了一个连续相变的唯象理论,提出了序参量的概念,认为连续相变的特征是物质有序程度的改变及与之相随的物质对称性的变化.在相变点温度以下的相,对称性较低,有序度较高,序参量非零;在相变点温度以上的相,对称性较高,有序度较低,序参量为零.随着温度降低,序参量在相变点连续地从零变到非零.

在等温等压条件下,系统平衡条件为热力势 G 极小.在相变点邻域,热力势 G 应该是序参量 η、温度 T 和压强 p 的函数,即 $G=G(T,p,\eta)$.由热力势 G 极小条件得到

$$\frac{\partial G(T,p,\eta)}{\partial \eta}=0 \tag{20.4.16}$$

上式就是决定序参量 $\eta=\eta(T,p)$ 的方程.令序参量为零就得到相变点温度 T_c 和压强 p_c 的关系,即 $\eta(T_c,p_c)=0$.该方程可能有多个解,那些满足稳定性条件(G 关于 η 的二阶导数大于零)的解才是可能存在的相,即

$$\frac{\partial^2 G(T,p,\eta)}{\partial \eta^2}>0 \tag{20.4.17}$$

当然在热力学范围内求出热力势 G 的一般表达式是不可能的，而且具体问题 G 的表达式也不同. 但是我们只研究在相变点邻域的情形，因为序参量 η 连续变化，在相变点邻域是一个小量，可以把热力势 G 展开成序参量 η 的幂级数，即

$$G = G(T,p,\eta) = G_0(T,p) + \alpha(T,p)\eta + \beta(T,p)\eta^2 + \gamma(T,p)\eta^3 + \delta(T,p)\eta^4 + \cdots \tag{20.4.18}$$

由于序参量 η 表征系统的有序程度，$+\eta$ 和 $-\eta$ 应该表示相同的有序度，故上式奇次项系数应该为零，即

$$G(T,p,\eta) = G_0(T,p) + \beta(T,p)\eta^2 + \delta(T,p)\eta^4 + \cdots \tag{20.4.19}$$

由方程(20.4.16)得到

$$\eta[2\beta(T,p) + 4\delta(T,p)\eta^2] \approx 0 \tag{20.4.20}$$

上式有三个解

$$\eta_1 = 0;\quad \eta_{2,3} = \pm\sqrt{-\frac{\beta}{2\delta}} \tag{20.4.21}$$

显然 $\eta_1 = 0$ 代表无序相，$\eta_{2,3}$ 代表有序相. 由稳定性条件式(20.4.17)得到

$$\frac{\partial^2 G(T,p,\eta)}{\partial \eta^2} = 2\beta + 12\delta\eta^2 > 0 \tag{20.4.22}$$

当 $\eta_1 = 0$ 时，上式为

$$\beta(T,p) \geqslant 0 \tag{20.4.23}$$

当 $\eta_{2,3} = \pm\sqrt{-\beta/2\delta}$ 时，式(20.4.22)给出

$$\beta(T,p) < 0 \tag{20.4.24}$$

因此在 T-p 图(即相图)上，无序相位于 $\beta(T,p)>0$ 的区域；而有序相位于 $\beta(T,p)<0$ 区域. 两个区域的边界就是临界态的曲线. 注意：连续相变没有两相共存情况，物质要么处于有序相位，要么处于无序相位. 如果分别用 1、2 表示无序相和有序相，在相变点邻域 $\beta(T,p)\sim 0$，则两相的热力势分别为

$$\begin{aligned} G_1(T,p) &= G_0(T,p),\quad \beta(T,p) \geqslant 0 \\ G_2(T,p) &= G_0(T,p) - \frac{1}{4}\frac{\beta^2}{\delta},\quad \beta(T,p) < 0 \end{aligned} \tag{20.4.25}$$

在临界态曲线上热力势相等，即 $G_1(T,p)|_{\beta=0} = G_2(T,p)|_{\beta=0} = G_0(T,p)$.

不仅如此，由式(20.4.25)得到

$$\left(\frac{\partial G_1}{\partial T}\right)_p\bigg|_{\beta=0} = \left(\frac{\partial G_2}{\partial T}\right)_p\bigg|_{\beta=0} = -S \tag{20.4.26a}$$

$$\left(\frac{\partial G_1}{\partial p}\right)_T\bigg|_{\beta=0} = \left(\frac{\partial G_2}{\partial p}\right)_T\bigg|_{\beta=0} = V \tag{20.4.26b}$$

所以从一相到另一相没有熵和体积的变化(与一级相变的区别). 但热力势的二阶导数有跃变，由式(20.4.25)得到(注意：在临界态曲线上 $\beta=0$)

$$\left(\frac{\partial^2 G_1}{\partial T^2}\right)_p\bigg|_{\beta=0} - \left(\frac{\partial^2 G_2}{\partial T^2}\right)_p\bigg|_{\beta=0} = \frac{1}{2}\frac{1}{\delta}\left(\frac{\partial\beta}{\partial T}\right)^2 \tag{20.4.27}$$

同样可得到

$$\left(\frac{\partial^2 G_1}{\partial p^2}\right)_p\bigg|_{\beta=0} - \left(\frac{\partial^2 G_2}{\partial p^2}\right)_p\bigg|_{\beta=0} = \frac{1}{2}\frac{1}{\delta}\left(\frac{\partial\beta}{\partial p}\right)^2 \tag{20.4.28}$$

在等压条件下，改变温度 T，当 $T=T_c$ 时，β 变号，最简单是假定

$$\beta = b(T-T_c) \tag{20.4.29}$$

因此序参量随温度的变化为

$$\eta = \sqrt{b(T_c-T)/2\delta} \sim (T_c-T)^{1/2} \tag{20.4.30}$$

上式假定 δ 随温度的变化无奇性.

以上的讨论与具体的系统无关. 把结果应用到铁磁-顺磁相变，取序参量为自发磁化强度 M，$\eta=M$，在临界点的邻域

$$M \sim (T_c-T)^{1/2} \tag{20.4.31}$$

临界指数为 $\gamma=0.5$，而实验为 $\gamma=0.30\sim0.36$. 差别是因为 Landau 的二级相变理论相当于平均场近似.

习　题　20

20.1　由热力学态函数证明 Maxwell 关系

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V;\quad \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = -\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V;\quad \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

（提示：由 $dU=TdS-pdV$ 以及微分关系

$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S dV$$

得到

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V;\quad p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S$$

于是

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = \frac{\partial^2 U}{\partial V\partial S};\quad \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V = -\frac{\partial^2 U}{\partial S\partial V}$$

考虑到求偏导数的次序可交换，就可以得到第一个关系，其他关系用态函数 H、F 和 G）

20.2　已知状态方程求基本热力学函数的表达式.（提示：选 T 和 V 为独立变量，状态方程为 $p=p(T,V)$，则

$$\mathrm{d}U = C_V \mathrm{d}T + \left[T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p\right]\mathrm{d}V; \quad \mathrm{d}S = \frac{C_V}{T}\mathrm{d}T + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \mathrm{d}V$$

如果选 T 和 p 为独立变量,状态方程为 $V=V(T,p)$,则

$$\mathrm{d}H = C_p \mathrm{d}T + \left[V - T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p\right]\mathrm{d}V; \quad \mathrm{d}S = \frac{C_p}{T}\mathrm{d}T - \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}p$$

然后求积分)

20.3 从 Maxwell 电磁场理论可以导出黑体辐射中压强与能量密度关系:$p=u/3$.(1) 求能量密度与温度的关系;(2) 求熵的表达式.(提示:黑体辐射的内能 $U(T,V)=u(T)V$,利用热力学关系

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p$$

得到

$$u = \frac{T}{3}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}T} - \frac{u}{3}$$

求解微分方程得到能量密度与温度的关系.又由

$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}U + p\mathrm{d}V}{T}$$

可以求得 S)

答案:(1) $u(T)=aT^4$;(2) $S=4aT^3V/3$.

20.4 实验表明:液体表面膜的表面张力系数 σ 仅为温度的函数 $\sigma=\sigma(T)$,且 σ 随温度的下降而增大,设表面膜的比热容为 c_A.(1) 当表面膜的表面积从 A_1 可逆等温膨胀到 A_2 时,求熵的变化.在此过程中,表面膜是吸热还是放热?(2) 求在可逆绝热膨胀过程中,温度随表面积的变化关系,温度随表面积的增大是上升还是下降?(提示:对表面膜做的元功为 $\mathrm{d}W=\sigma\mathrm{d}A$,热力学第一定律为:$\mathrm{d}U=T\mathrm{d}S+\sigma\mathrm{d}A$,自由能为 $\mathrm{d}F=-S\mathrm{d}T+\sigma\mathrm{d}A$.故

$$\left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_T = -\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right)_A = -\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T}$$

熵的方程为

$$\mathrm{d}S = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_A \mathrm{d}T + \left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_T \mathrm{d}A = \frac{c_A}{T}\mathrm{d}T - \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T}\mathrm{d}A$$

在可逆绝热过程中 $\mathrm{d}S=0$)

答案:(1) $\Delta S=-\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T}(A_2-A_1)$,$Q=T\Delta S=-T\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T}(A_2-A_1)>0$;

(2) $\left(\frac{\partial T}{\partial A}\right)_S = \frac{T}{c_A}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T}$.

20.5 在一个无限小的准静态过程中,外界对磁介质做功可表示为

$$dW = \mu_0 H dM$$

式中 H 为外磁场，M 为介质的总磁矩，$M=mV$（m 为介质的磁化强度）. 磁介质的总磁矩和内能分别为

$$M = \frac{aH}{T}; \quad U = C_M T$$

式中 a、C_M 为常数. 求：(1) 磁场不变时热容量 C_H；(2) 温度保持不变，磁场从 H_0 变到 H_1，熵的变化.（提示：第一定律 $dU=TdS+\mu_0 HdM$，故

$$TdS = dU - \mu_0 H dM = C_M dT - \mu_0 H d\left(\frac{aH}{T}\right)$$

$$= \left(C_M + \frac{a\mu_0 H^2}{T^2}\right) dT - \frac{a\mu_0 H}{T} dH$$

然后求得

$$C_H = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H$$

(2) 因为内能仅是温度的函数，等温过程内能不变 $dU=TdS+\mu_0 HdM=0$，故 $dS=-a\mu_0 HT^{-2}dH$，求积分得到 ΔS）

答案：$C_H=C_M+\frac{\mu_0 aH^2}{T^2}$；$\Delta S=\frac{a\mu_0}{2T^2}(H_0^2-H_1^2)$.

20.6　磁介质置于外磁场 H 中，并受到外压力的作用. 对于等温可逆过程证明：(1) 磁致伸缩与压磁效应之间的关系

$$\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_{T,p} = -\mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial p}\right)_{T,H}$$

(2) 磁场由零到 H（弱场）时因磁致伸缩而产生的体积相对变化为

$$\frac{\Delta V}{V} \approx \frac{\mu_0 H^2}{2}\left[\chi\kappa_T - \left(\frac{\partial \chi}{\partial p}\right)_T\right]$$

式中 κ_T 为等温压缩系数，χ 为介质磁化率.（提示：外界对磁介质的元功为

$$dW = -pdV + \mu_0 H dM$$

故热力学第一定律为 $dU=TdS-pdV+\mu_0 HdM$，热力势及其全微分为

$$G = U - TS + pV - \mu_0 HM$$

$$dG = -SdT + Vdp - \mu_0 MdH$$

故

$$\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_{T,p} = -\mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial p}\right)_{T,H}$$

上式左边表示磁致伸缩，而右边表示压磁效应. 设介质的磁化率为 χ，$M=mV=\chi HV$，等温过程中

$$\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_{T,p} = -\mu_0 \left(\frac{\partial M}{\partial p}\right)_{T,H} = -\mu_0 H\left[V\left(\frac{\partial \chi}{\partial p}\right)_T + \chi\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T\right]$$

$$=-\mu_0 HV\left[\left(\frac{\partial\chi}{\partial p}\right)_T-\chi\kappa_T\right]$$

故

$$\int_V^{V+\Delta V}\frac{\mathrm{d}V}{V}=-\mu_0\int_0^H H\left[\left(\frac{\partial\chi}{\partial p}\right)_T-\chi\kappa_T\right]\mathrm{d}H$$

然后利用关系 $\ln\left(1+\frac{\Delta V}{V}\right)\approx\frac{\Delta V}{V}$）

20.7　若电介质的状态方程为

$$P=\frac{cVE}{T}$$

其中 P 为电偶极矩，E 为电场强度，V 为电介质体积，c 为常数，设电介质的热容量 C_E 为常量. 证明：(1) 在等温过程中，当电场强度从 E_1 变到 E_2，电介质吸收的热量为

$$Q=-\frac{C_V}{T}(E_2^2-E_1^2)$$

(2) 在可逆绝热过程中，当电场强度从 E_1 变到 E_2，电介质的温度变化为

$$\Delta T=T_2-T_1=T_1\left[\sqrt{1+\frac{C_V}{C_E T_1^2}(E_2^2-E_1^2)}-1\right]\approx\frac{C_V}{C_E T_1}\Delta E$$

其中 C_E 等电场热容量.（提示：第一定律为 $\mathrm{d}U=T\mathrm{d}S+E\mathrm{d}P$，选择 T、E 为独立变量，热力势 $G=U-TS-EP$ 的全微分为 $\mathrm{d}G=-S\mathrm{d}T-P\mathrm{d}E$. 故

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_T=\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_E$$

$$T\mathrm{d}S=T\left[\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_E\mathrm{d}T+\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_T\mathrm{d}E\right]$$

$$=C_E\mathrm{d}T+T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_E\mathrm{d}E=C_E\mathrm{d}T-\frac{C_V}{T}E\mathrm{d}E$$

等温过程 $\mathrm{d}T=0$；可逆绝热过程：$\bar{\mathrm{d}}Q=T\mathrm{d}S=0$）

20.8　在介质中传播的低频声波的声速为

$$c=\sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial\rho}\right)_S}=\sqrt{-\frac{V^2}{M}\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S}$$

式中 M 为介质的质量，V 为体积. 证明处于临界状态的介质声速为零.（提示：先证明关系

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S=\frac{C_p}{C_V}\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T$$

在临界状态，当 $T\to T_c$，$\kappa_T\to\infty$，于是 $c\to0$）

第21章　准独立粒子系的经典统计

统计物理学与热力学的研究对象都是由大数(10^{23}数量级)微观粒子组成的系统，但二者的研究方法不同. 统计物理学是根据大数微观粒子的运动特征、粒子间的相互作用来解释物质的宏观性质. 但又不去追究个别粒子的运动细节，而是在承认大数微观粒子系统运动(包括系统与外界媒质的相互作用)带有统计性的前提下，寻找系统出现在各个微观状态的几率分布. 利用这个几率分布，来求宏观物理量的统计平均值. 因此，确定各微观状态出现的概率是统计物理的根本问题.

对准独立粒子系统，单粒子的状态、能量有确切意义，系统的能量是各个微观粒子能量的总和. 但是，准独立粒子只是忽略了粒子之间的相互作用，因为粒子之间的相互作用能远远小于粒子的动能. 但必须注意，如果粒子之间完全没有相互作用，那么热力学平衡态是不可能达到的. 准独立粒子系统包括：理想气体系统、黑体辐射中的光子气体、研究晶格振动对热容量贡献的声子气体，以及研究导体中电子对热容量贡献的电子气体. 本章讨论准独立粒子系统平衡态的 Boltzmann 统计. Boltzmann 统计假定每个微观粒子是可分辨的，不考虑微观粒子的全同性，因此是经典的统计方法.

21.1　平衡态的 Boltzmann 统计和等概率原理

Boltzmann 提出了著名的**等概率原理**：处于平衡态的孤立系统，系统各个可能的微观状态出现的概率相等. 根据该原理，可以求出系统出现在各个微观状态的几率分布. 此外，Boltzmann 统计的两个假定是：①准独立粒子系统；②每个粒子是可分辨的. 我们将在下章讨论由全同粒子组成的准独立粒子系统的统计方法.

设有一个体积、能量和粒子数都给定的准独立粒子系统，单粒子能级为 ε_1，ε_2，…. 设 N 个粒子在单粒子能级上有一种分布：

第一个能级 ε_1 上有 n_1 个粒子占据；

第二个能级 ε_2 上有 n_2 个粒子占据；

……

第 i 个能级 ε_i 上有 n_i 个粒子占据；

……

对于这样一种分布用符号$\{n_i\}$表示. 提出的问题是：哪 n_i 个粒子占据了第 i 个能级 ε_i? 如果能级 ε_i 的简并度为 g_i，那么这 n_i 个粒子占据 g_i 个量子态的方式是

什么?

给定一种分布$\{n_i\}$后,还存在许许多多不同方式占据各个能级上的单粒子态,每一种特定的占据方式称为**系统的一个微观状态**.由等概率原理,每个微观状态出现的概率是相等的,在各种分布$\{n_i\}$中,哪一种分布所含的微观态愈多,那么这种分布出现的概率也愈大.如果存在一种分布$\{n_i\}$,它所包含的微观态数目远远比所有其余分布包含的微观态总和还多得多,则作为一种很好的近似,可以把这种概率最大的分布作为平衡态的唯一分布.因此寻求统计平衡时的分布$\{n_i\}$变为在各种分布中求微观状态数最多的那种分布.这种方法称为**最可几统计法**.

为此必须求任意一种分布$\{n_i\}$所包含的微观状态数.对给定一种分布$\{n_i\}$,因为每个粒子是可分辨的,属于不同能级的任意两个粒子交换将产生不同的微观状态. N个粒子有$N!$种交换方式,但在同一个能级的粒子交换并不改变分布,故必须除去能级ε_i上n_i个粒子的交换数$n_i!$.此外,如果能级ε_i的简并度为g_i,那么n_i个粒子占据g_i个量子态的方式数为$g_i^{n_i}$.故任意一种分布$\{n_i\}$所包含的微观状态数为

$$\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\}) = \frac{N!}{\prod_i n_i!}\prod_i g_i^{n_i} \tag{21.1.1}$$

根据最可几统计法,问题变为求Ω^{M}的极值.上式两边取对数

$$\ln\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\}) = \ln N! - \sum_i \ln n_i! + \sum_i n_i \ln g_i \tag{21.1.2}$$

在统计物理中,$N\gg 1$和$n_i\gg 1$,故由 Stirling 公式有

$$\ln N! \approx N(\ln N - 1);\quad \ln n_i! \approx n_i(\ln n_i - 1) \tag{21.1.3}$$

另外,因系统的粒子数N和能量E给定,故存在约束条件

$$\sum_i n_i = N;\quad \sum_i n_i\varepsilon_i = E \tag{21.1.4}$$

式(21.1.3)代入式(21.1.2)并利用上式第一个方程得到

$$\ln\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\}) = N\ln N - \sum_i (n_i\ln n_i - n_i \ln g_i) \tag{21.1.5}$$

$\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\})$与$\ln\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\})$的极值点相同.根据 Lagrange 乘子法,求$\ln\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\})$在约束条件(21.1.4)下的极值点就是求不存在约束条件时,新函数Ξ的极值点

$$\ln\Xi = \ln\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\}) + \gamma\Big(N - \sum_i n_i\Big) + \beta\Big(E - \sum_i n_i\varepsilon_i\Big) \tag{21.1.6}$$

式中γ和β为 Lagrange 乘子.极值条件为

$$\delta\ln\Xi = -\sum_i (\ln n_i + 1 - \ln g_i)\delta n_i - \gamma\sum_i \delta n_i - \beta\sum_i \delta n_i\varepsilon_i = 0 \tag{21.1.7}$$

即

$$\delta\ln\Xi = -\sum_i (\ln n_i + 1 - \ln g_i + \gamma + \beta\varepsilon_i)\delta n_i = 0 \tag{21.1.8}$$

选择 γ 和 β，使不独立 δn_i 前的系数为零，而独立变分前的系数必须为零，故

$$\ln n_i + 1 - \ln g_i + \gamma + \beta\varepsilon_i = 0$$

即

$$n_i = g_i \exp(-\alpha - \beta\varepsilon_i) \tag{21.1.9}$$

其中已令 Lagrange 乘子 $1+\gamma \equiv \alpha$. 上式给出可分辨、准独立粒子系的最可几分布，称为 **Boltzmann 分布**. Lagrange 乘子 α 和 β 由约束条件(21.1.4)决定

$$\sum_i g_i \exp(-\alpha - \beta\varepsilon_i) = N; \quad \sum_i g_i \exp(-\alpha - \beta\varepsilon_i)\varepsilon_i = E \tag{21.1.10}$$

由第一式

$$\sum_i g_i \exp(-\beta\varepsilon_i) = N\exp(\alpha) \tag{21.1.11}$$

代入方程(21.1.9)得到

$$n_i = \frac{N g_i \exp(-\beta\varepsilon_i)}{\sum_i g_i \exp(-\beta\varepsilon_i)} \tag{21.1.12}$$

为了分析 β 的意义，考虑两个独立系统 1 和 2，粒子数分别为 $N^{(1)}$ 和 $N^{(2)}$，它们各有自己的单粒子能级 $\varepsilon_i^{(1)}$ 和 $\varepsilon_i^{(2)}$，以及相应的简并度 $g_i^{(1)}$ 和 $g_i^{(2)}$. 当它们在不同的外界条件下达到统计热平衡后，各自处于 Boltzmann 分布

$$\begin{aligned} n_i^{(1)} &= \frac{N^{(1)} g_i^{(1)} \exp[-\beta^{(1)}\varepsilon_i^{(1)}]}{\sum_i g_i^{(1)} \exp[-\beta^{(1)}\varepsilon_i^{(1)}]} \\ n_i^{(2)} &= \frac{N^{(2)} g_i^{(2)} \exp[-\beta^{(2)}\varepsilon_i^{(2)}]}{\sum_i g_i^{(2)} \exp[-\beta^{(2)}\varepsilon_i^{(2)}]} \end{aligned} \tag{21.1.13}$$

现在不改变两个系统的外界条件下，让它们进行热接触，直到它们处于新的平衡而具有相同的温度. 设在新的平衡态中，两个子系统的分布分别为 $\tilde{n}_i^{(j)}$ $(j=1,2)$，那么总系统包含的微观状态数为

$$\begin{aligned} \Omega^{\mathrm{M}} &= \Omega^{\mathrm{M}}(\{\tilde{n}_i^{(1)}\})\Omega^{\mathrm{M}}(\{\tilde{n}_i^{(2)}\}) \\ &= \left[\frac{N^{(1)}!}{\prod_i \tilde{n}_i^{(1)}!}\prod_i g_i^{(1)\tilde{n}_i^{(1)}}\right] \cdot \left[\frac{N^{(2)}!}{\prod_i \tilde{n}_i^{(2)}!}\prod_i g_i^{(2)\tilde{n}_i^{(2)}}\right] \end{aligned} \tag{21.1.14}$$

约束条件为：①每个系统的粒子数守恒；②两个系统的总能量不变，即

$$\sum_i \tilde{n}_i^{(1)} = N^{(1)}; \quad \sum_i \tilde{n}_i^{(2)} = N^{(2)} \tag{21.1.15}$$

$$\sum_i (\tilde{n}_i^{(1)}\varepsilon_i^{(1)} + \tilde{n}_i^{(2)}\varepsilon_i^{(2)}) = E \tag{21.1.16}$$

注意：由于两个系统的外界条件，即外参量不变，故两个系统的单粒子能级 $\{\varepsilon_i^{(1)}, \varepsilon_i^{(2)}\}$ 和简并度 $\{g_i^{(1)}, g_i^{(2)}\}$ 都不变. 新的最可几分布为求新函数 $\tilde{\Xi}$ 的极值点

$$\ln\tilde{\Xi} = \ln\Omega^{\mathrm{M}} + \gamma^{(1)}\left(N^{(1)} - \sum_i \tilde{n}_i^{(1)}\right) + \gamma^{(2)}\left(N^{(2)} - \sum_i \tilde{n}_i^{(2)}\right)$$

$$+\beta\left[E-\sum_i \left(\tilde{n}_i^{(1)}\varepsilon_i^{(1)}+\tilde{n}_i^{(2)}\varepsilon_i^{(2)}\right)\right] \tag{21.1.17}$$

与得到方程(21.1.12)类似

$$\delta\ln\tilde{\Xi}=-\sum_i\left[\ln\tilde{n}_i^{(1)}+1-\ln g_i^{(1)}\right]\delta\tilde{n}_i^{(1)}-\sum_i\left[\ln\tilde{n}_i^{(2)}+1-\ln g_i^{(1)}\right]\delta\tilde{n}_i^{(2)}$$
$$-\left[\gamma^{(1)}\sum_i\delta\tilde{n}_i^{(1)}+\gamma^{(2)}\sum_i\delta\tilde{n}_i^{(2)}\right]-\beta\sum_i\left[\delta\tilde{n}_i^{(1)}\varepsilon_i^{(1)}+\delta\tilde{n}_i^{(2)}\varepsilon_i^{(2)}\right]=0$$

由此得到新的最可几分布为

$$\tilde{n}_i^{(1)}=\frac{N^{(1)}g_i^{(1)}\exp[-\beta\varepsilon_i^{(1)}]}{\sum_i g_i^{(1)}\exp[-\beta\varepsilon_i^{(1)}]}$$
$$\tilde{n}_i^{(2)}=\frac{N^{(2)}g_i^{(2)}\exp[-\beta\varepsilon_i^{(2)}]}{\sum_i g_i^{(2)}\exp[-\beta\varepsilon_i^{(2)}]} \tag{21.1.18}$$

比较上式与方程(21.1.13),唯一的区别是上式两个分布中 β 相同. 两个系统是通过热接触而达到热平衡的,故根据热力学,它们的温度相同. 因此 β 是温度的函数,即 $\beta=\beta(T)$. 根据量纲分析,$1/\beta$ 应该具有能量的量纲,最简单的选择是 $1/\beta\sim T$,即 $1/\beta=k_BT$,其中 k_B 为 Boltzmann 常量. 以后将看到这种选择的正确性. 最后我们得到可分辨、准独立粒子系的 Boltzmann 分布为

$$\frac{n_i}{N}=\frac{g_i\exp(-\beta\varepsilon_i)}{\sum_i g_i\exp(-\beta\varepsilon_i)} \tag{21.1.19}$$

其中 $\beta=1/(k_BT)$. 也可以把 $w_i=n_i/N$ 理解为粒子占据能级 ε_i 的概率. 上式表明:能量越高的能级,粒子占据的概率越低;而简并度越高的能级粒子占据的概率越高. 但前者是指数关系,故占据概率主要决定于能级. 显然 ε_i 和 ε_k 能级上的占据概率之比为

$$\frac{w_i}{w_k}=\frac{g_i}{g_k}\exp[-\beta(\varepsilon_i-\varepsilon_k)] \tag{21.1.20}$$

例 21.1.1 常温下氢原子基态和第一激发态原子数之比.

解: 氢原子基态和第一激发态能级分别为 $\varepsilon_0=-13.6\text{eV}$ 和 $\varepsilon_1=-3.4\text{eV}$,简并度分别为 2 和 8. 在常温下($T=300\text{K}$),基态和第一激发态的占据概率之比为 $w_1/w_0\approx4\exp(-389)\approx0$,故在常温下,原子基本处于基态,除非温度特别高.

21.2 热力学函数与熵的微观解释

设单粒子态能级 ε_i 是外参量$(y_1,y_2,\cdots,y_n)$的函数 $\varepsilon_i(y_1,y_2,\cdots,y_n)$. 如果外参量有一个微小的变化,则单粒子态能级 ε_i 的变化为

$$\mathrm{d}\varepsilon_i=\sum_{k=1}^n\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial y_k}\mathrm{d}y_k\equiv\sum_{k=1}^n Y_k^i\mathrm{d}y_k \tag{21.2.1}$$

式中

$$Y_k^i = \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial y_k} \tag{21.2.2}$$

可看作外界对处于能级 ε_i 的一个粒子施加的广义力. 外界对系统作的功应该等于对所有状态上的全部粒子做的功之和,即

$$dW = \sum_i n_i \sum_{k=1}^n Y_k^i dy_k = \sum_i n_i \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial y_k} dy_k \right) = \sum_i n_i d\varepsilon_i \tag{21.2.3}$$

上式也可以写成

$$dW = \sum_i n_i \sum_{k=1}^n Y_k^i dy_k = \sum_{k=1}^n \left(\sum_i n_i Y_k^i \right) dy_k \equiv \sum_{k=1}^n Y_k dy_k \tag{21.2.4}$$

式中

$$Y_k = \sum_i n_i Y_k^i \tag{21.2.5}$$

可看作外界对系统施加广义力的第 k 个分量. 另一方面,系统内能的可逆微变化为

$$dU = d\left(\sum_i n_i \varepsilon_i \right) = \sum_i n_i d\varepsilon_i + \sum_i \varepsilon_i dn_i \tag{21.2.6}$$

比较方程(21.2.3),式(21.2.6)第一项为外界对系统做的功,根据热力学第一定律,第二项必定是系统从外界吸收的热量

$$\bar{d}Q = \sum_i \varepsilon_i dn_i \tag{21.2.7}$$

于是,根据可逆微变化的熵定义,有关系

$$dS = \frac{\bar{d}Q}{T} = \frac{1}{T} \sum_i \varepsilon_i dn_i = \frac{1}{T} \left(dU - \sum_i n_i d\varepsilon_i \right) \tag{21.2.8}$$

考虑到 $1/\beta = k_B T$,上式变为

$$\begin{aligned} dS &= d\left(\frac{U}{T} \right) - k_B \left(\sum_i n_i \varepsilon_i d\beta + \beta \sum_i n_i d\varepsilon_i \right) \\ &= d\left(\frac{U}{T} \right) - \frac{N k_B}{Z} \left[\sum_i g_i \varepsilon_i \exp(-\beta \varepsilon_i) d\beta + \beta \sum_i g_i \exp(-\beta \varepsilon_i) d\varepsilon_i \right] \\ &= d\left(\frac{U}{T} \right) + \frac{N k_B}{Z} d\left(\sum_i g_i \exp(-\beta \varepsilon_i) \right) = d\left(\frac{U}{T} \right) + N k_B d(\ln Z) \end{aligned}$$

式中函数 Z 为

$$Z = \sum_i g_i \exp(-\beta \varepsilon_i) \tag{21.2.9}$$

称为独立粒子系统的**状态函数**,也称**配分函数**. 于是,熵函数为

$$S - S_0 = \frac{U}{T} + N k_B \ln Z \tag{21.2.10}$$

其中 S_0 为积分常数. 另一方面,显然有关系

$$U = \sum_i n_i \varepsilon_i = \frac{N}{Z} \sum_i g_i \varepsilon_i \exp(-\beta \varepsilon_i)$$

$$=-\frac{N}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_i g_i\exp(-\beta\varepsilon_i)=-N\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta} \tag{21.2.11}$$

代入方程(21.2.10)得到

$$S-S_0=k_BN\left(\ln Z-\beta\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta}\right) \tag{21.2.12}$$

又由自由能函数的定义得到

$$F=U-TS=-Nk_BT\ln Z-S_0T \tag{21.2.13}$$

故对简单的 p-V 系统,由微分关系 $\mathrm{d}F=-S\mathrm{d}T-p\mathrm{d}V$ 得到

$$p=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T=Nk_BT\left(\frac{\ln Z}{\partial V}\right)_T \tag{21.2.14}$$

上式给出系统的状态方程.对非 p-V 系统,一般的关系为

$$\mathrm{d}F=-S\mathrm{d}T+\sum_i Y_i\mathrm{d}y_i \tag{21.2.15}$$

故广义力为

$$Y_i=\left(\frac{\partial F}{\partial y_i}\right)_T=-Nk_BT\left(\frac{\partial\ln Z}{\partial y_i}\right)_T \tag{21.2.16}$$

熵的微观解释:由式(21.1.11)两边取对数得到

$$\ln Z=\ln N+\alpha \tag{21.2.17}$$

代入式(21.2.10)

$$\begin{aligned}S-S_0&=k_B(\beta\sum_i n_i\varepsilon_i+N\ln N+\alpha N)\\&=k_B(N\ln N+\sum_i(\alpha+\beta\varepsilon_i)n_i)\\&=k_B\left[N\ln N+\sum_i(n_i\ln g_i-n_i\ln n_i)\right]\\&=k_B\left[N\ln N-\sum_i n_i\ln(n_i/g_i)\right]\end{aligned} \tag{21.2.18}$$

得到上式已利用方程(21.1.9):$(\alpha+\beta\varepsilon_i)=\ln g_i-\ln n_i$. 比较上式与方程(21.1.5),显然有关系

$$S-S_0=k_B\ln\Omega^M(\{n_i\}) \tag{21.2.19}$$

上式表明:熵与微观状态数紧密联系,微观状态数极大意味着熵极大.假设一种极端的分布:所有粒子处在同一个能级且这个能级的简并度为 1.对这种分布,微观状态数为 1(称这种分布是完全有序的),而 $\ln\Omega^M(\{n_i\})=0$. 从方程(21.2.18)最后一个等式也可看到,如果各个单粒子态上的粒子数 n_i/g_i 减少,熵增加;由于粒子总数 N 一定,n_i/g_i 的减少意味着系统占据的单粒子态数目增加,也就是说,粒子的运动状态从较“有序”变为较“无序”.所以熵增加过程也是系统无序度增加或有序度减少的过程.**因此熵是系统有序度的量度.**

方程(21.2.19)推导过程用到 Boltzmann 分布,但可以直接由此定义系统的

熵. 从"有序"到"无序",直至"完全无序",系统的熵增加,直至达到极大;相应地,系统从"完全非平衡"状态演化到"近平衡状态",直至平衡状态. 为了满足熵是广延量的要求,取积分常数为 $S_0=-k_B\ln N!$（在 22.2 节中讨论其意义）,于是熵定义为

$$S=k_B\ln\frac{\Omega^M(\{n_i\})}{N!}\tag{21.2.20}$$

相应地,用配分函数表示的熵和自由能分别为

$$S=Nk_B\left(\ln Z-\beta\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta}\right)-k_B\ln N!\tag{21.2.21}$$

$$\begin{aligned}F=U-TS&=-Nk_BT\ln Z+k_BT\ln N!\\&\approx-Nk_BT\ln\frac{eZ}{N}\end{aligned}\tag{21.2.22}$$

由上二式和方程(21.2.11)可看出,只要求得了系统的配分函数,就可以求得全部态函数. 求配分函数的第一步是求单粒子能级分布,然后再求和得到配分函数. 但是如果两个能级的间距 $\Delta\varepsilon\ll k_BT$,则能量可看作是连续变化的,此时约化 Planck 常量 $\hbar$ 的作用已很小,可以用经典方法处理.

经典近似:一般单粒子能量是广义坐标和广义动量的函数,即 $\varepsilon(q_\alpha,p_\alpha)(\alpha=1,2,\cdots,r)$,其中 r 是系统的自由度. 当约化 Planck 常量 $\hbar\to0$ 时,在相空间内的任何小区域中包含的状态数都为无限,这是因为相空间中的每一个几何点都代表粒子的一个运动状态. 但实际上 $\hbar$ 尽管小,总有一定大小,在计算微观状态数时起了很大的作用. 根据量子力学的不确定关系,广义坐标与共轭动量不对易,不能同时确定,即

$$\Delta q_\alpha\Delta p_\alpha\sim2\pi\hbar\quad(\alpha=1,2,\cdots,r)\tag{21.2.23}$$

我们不能用相空间中一个几何点来完全确定粒子的运动状态. 合理的修正是:用大小为 $(2\pi\hbar)^r$ 的小格子来代替几何点,从而计算粒子的状态数. 于是,相空间中体积元 $d\mu=dq_1dq_2\cdots dq_rdp_1dp_2\cdots dp_r$ 内包含的状态数为

$$\frac{d\mu}{(2\pi\hbar)^r}=\frac{dq_1dq_2\cdots dq_rdp_1dp_2\cdots dp_r}{(2\pi\hbar)^r}\tag{21.2.24}$$

显然能量落在 $\varepsilon\to\varepsilon+d\varepsilon$ 间隔的状态数为

$$g(\varepsilon)d\varepsilon=\int_{\varepsilon\to\varepsilon+d\varepsilon}\frac{d\mu}{(2\pi\hbar)^r}\tag{21.2.25}$$

$g(\varepsilon)$称为**态密度**. 于是配分函数为

$$Z=\frac{1}{(2\pi\hbar)^r}\iint_{2r}\exp[-\beta\varepsilon(q_\alpha,p_\alpha)]dq_\alpha dp_\alpha\tag{21.2.26}$$

值得注意的是,如果粒子运动包括平动、转动和振动自由度,那么并不是每个自由度都可以用经典方法来处理. 我们对这三种自由度进行讨论.

平动:假定粒子是处于边长为 L 的立方容器内的自由粒子,根据量子力学,粒

子三个动量分量为

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_x; \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_y; \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L}n_z$$

$$(n_x, n_y, n_z = \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{21.2.27}$$

能级为

$$\varepsilon = \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{21.2.28}$$

能级差为

$$\Delta\varepsilon \sim \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2} \tag{21.2.29}$$

如果粒子局域在原子尺度(1Å)范围内,$\Delta\varepsilon \sim k_B T$,量子效应不能忽略;如果粒子限制在宏观大小的容器内运动 $L \sim 1.0\text{cm}$,那么即使在低温下($T \sim 10^{-3}\text{K}$),也有 $\Delta\varepsilon \ll k_B T$,故可用经典处理. 由式(21.2.27),在动量区间

$$p_x \to p_x + \mathrm{d}p_x, \quad p_y \to p_y + \mathrm{d}p_y, \quad p_z \to p_z + \mathrm{d}p_z \tag{21.2.30}$$

间隔范围内可能的 p_x, p_y 和 p_z 数目为

$$\begin{aligned} \mathrm{d}N \equiv \mathrm{d}n_x \mathrm{d}n_y \mathrm{d}n_z &= \frac{L}{2\pi\hbar}\mathrm{d}p_x \cdot \frac{L}{2\pi\hbar}\mathrm{d}p_y \cdot \frac{L}{2\pi\hbar}\mathrm{d}p_z \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\mathrm{d}p_x \mathrm{d}p_y \mathrm{d}p_z \end{aligned} \tag{21.2.31}$$

其中 $V = L^3$ 为容器体积. 在球坐标下,如果状态数各向同性,即只与 p 有关,则

$$g(p)\mathrm{d}p \equiv \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}4\pi p^2 \mathrm{d}p = \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3}p^2 \mathrm{d}p \tag{21.2.32}$$

对经典的自由粒子 $\varepsilon = p^2/(2m)$,得到能量在 $\varepsilon \to \varepsilon + \mathrm{d}\varepsilon$ 间隔内的状态数为

$$g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \equiv \frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon \tag{21.2.33}$$

配分函数为

$$Z = \sum_i g_i \exp(-\beta\varepsilon_i) = \int g(\varepsilon)\exp(-\beta\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon \tag{21.2.34}$$

如果 ε 是动量的函数,上式改为

$$Z = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\iiint \exp[-\beta\varepsilon(p_x, p_y, p_z)]\mathrm{d}p_x \mathrm{d}p_y \mathrm{d}p_z \tag{21.2.35}$$

转动:对多原子分子,除平动自由度外,还有转动自由度. 对转动自由度,Hamilton 函数为 $H = L^2/(2I)$,其中 L 为角动量,I 为分子的转动惯量. 分子转动的能级和简并度为

$$\varepsilon^r = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}, \quad g^r = (2l+1) \quad (l = 0, 1, 2, \cdots) \tag{21.2.36}$$

以氢分子为例,在常温下,能级差与 $k_B T$ 在同一数量级,即

$$\Delta\varepsilon_l = \frac{\hbar^2}{2I} \sim k_B T \tag{21.2.37}$$

故必须考虑量子效应. 但在高温下，$\Delta\varepsilon_l \ll k_B T$ 可用经典处理；

振动：对于振动自由度，能级和简并度为

$$\varepsilon^v = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad g^v = 1 \quad (n = 0, 1, 2\cdots) \tag{21.2.38}$$

对氢分子，能级差远大于 $k_B T$，即 $\Delta\varepsilon = \hbar\omega \gg k_B T$，故必须用量子力学，只有在极高的温度下才能用经典方法.

21.3　双原子分子组成的理想气体和能量均分定理

假定理想气体由双原子分子组成，分子数和体积分别为 N 和 V. 首先考虑两个原子不同情况，这时微观粒子全同性对转动没有影响. 双原子分子具有平动、转动和振动自由度，单分子能量为

$$\varepsilon = \varepsilon^t + \varepsilon^r + \varepsilon^v \tag{21.3.1}$$

配分函数为

$$Z = \sum g^t g^v g^r \exp[-\beta(\varepsilon^t + \varepsilon^v + \varepsilon^r)] \equiv Z^t \cdot Z^v \cdot Z^r \tag{21.3.2}$$

其中

$$Z^\alpha = \sum g^\alpha \exp(-\beta\varepsilon^\alpha) \quad (\alpha = \mathrm{t}, \mathrm{v}, \mathrm{r}) \tag{21.3.3}$$

分别为双原子分子的平动、转动和振动自由度的配分函数. 系统的内能为

$$U = -N\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \equiv U^t + U^r + U^v \tag{21.3.4}$$

其中

$$U^t = -N\frac{\partial \ln Z^t}{\partial \beta}; \quad U^v = -N\frac{\partial \ln Z^v}{\partial \beta}; \quad U^r = -N\frac{\partial \ln Z^r}{\partial \beta} \tag{21.3.5}$$

分别为双原子分子的平动、转动和振动自由度对内能的贡献. 系统的定容热容量

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \equiv C_V^t + C_V^v + C_V^r \tag{21.3.6}$$

其中

$$C_V^t = \left(\frac{\partial U^t}{\partial T}\right)_V; \quad C_V^v = \left(\frac{\partial U^v}{\partial T}\right)_V; \quad C_V^r = \left(\frac{\partial U^r}{\partial T}\right)_V \tag{21.3.7}$$

分别为平动、转动和振动自由度对定容热容量的贡献.

平动自由度：根据上节的讨论，可用经典方法处理平动，分子的动能为

$$\varepsilon^t = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \tag{21.3.8}$$

由式(21.2.35)，平动自由度的配分函数为

$$Z^{t}=\frac{V}{(2\pi\hbar)^{3}}\iiint\exp(-\beta\varepsilon^{t})\mathrm{d}p_{x}\mathrm{d}p_{y}\mathrm{d}p_{z}=\frac{V}{(2\pi\hbar)^{3}}(2\pi mk_{\mathrm{B}}T)^{3/2}\quad(21.3.9)$$

内能函数与温度成正比，即

$$U^{t}=-N\frac{\partial\ln Z^{t}}{\partial\beta}=\frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T\quad(21.3.10)$$

故定容热容量为常数且与温度无关：$C_{V}^{t}=3Nk_{\mathrm{B}}/2$.

转动自由度：由式(21.2.36)，转动自由度的配分函数为

$$Z^{r}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left[-\beta\frac{l(l+1)\hbar^{2}}{2I}\right]\quad(21.3.11a)$$

分高温和低温两种情况讨论上式：①在高温($\beta\to0$)近似下，转动自由度可用经典处理，可把配分函数中的求和化成积分

$$\begin{aligned}Z^{r}&=\int_{0}^{\infty}(2l+1)\exp\left[-\beta\frac{l(l+1)\hbar^{2}}{2I}\right]\mathrm{d}l\\&=\frac{2I}{\hbar^{2}\beta}\equiv\frac{T}{T_{c}^{r}}\quad(T\gg T_{c}^{r})\end{aligned}\quad(21.3.11b)$$

其中 $T_{c}^{r}=\hbar^{2}/(2k_{\mathrm{B}}I)\ll T$ 为高温条件. 故转动对定容热容量的贡献也为常量 $C_{V}^{r}=Nk_{\mathrm{B}}$；②在低温近似下($\beta\to\infty$)，式(21.3.11a)中求和只保留二项，故

$$Z^{r}\approx1+3\exp\left(-2\frac{T_{c}^{r}}{T}\right)\quad(T\ll T_{c}^{r})\quad(21.3.12)$$

相应的定容热容量为

$$C_{V}^{r}\approx12Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T_{c}^{r}}{T}\right)^{2}\exp\left(-2\frac{T_{c}^{r}}{T}\right)\quad(T\ll T_{c}^{r})\quad(21.3.13)$$

振动自由度：只能用量子方法来处理，由式(21.2.38)，振动自由度的配分函数为

$$Z^{v}=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[-\beta\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right]=\frac{\exp(-\beta\hbar\omega/2)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)}\quad(21.3.14)$$

相应的内能为

$$U^{v}=\frac{1}{2}N\hbar\omega+\frac{N\hbar\omega}{\exp(\beta\hbar\omega)-1}\quad(21.3.15)$$

①在高温($\beta\to0$)近似下，$\exp(\beta\hbar\omega)\approx1+\beta\hbar\omega\equiv1+T_{c}^{v}/T$，其中 $T_{c}^{v}=\hbar\omega/k_{\mathrm{B}}\ll T$ 为高温条件，故振动对定容热容量的贡献为 $C_{V}^{v}=Nk_{\mathrm{B}}$；②在低温($\beta\to\infty$)近似下

$$U^{v}\approx\frac{1}{2}N\hbar\omega+N\hbar\omega\exp\left(-\frac{T_{c}^{v}}{T}\right)\quad(T\ll T_{c}^{v})\quad(21.3.16)$$

相应的定容热容量为

$$C_{V}^{v}\approx Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T_{c}^{v}}{T}\right)^{2}\exp\left(-\frac{T_{c}^{v}}{T}\right)\quad(T\ll T_{c}^{v})\quad(21.3.17)$$

最后，我们得到双原子分子的总定容热容量为

1. 高温近似下

$$C_V = C_V^{t} + C_V^{v} + C_V^{r} = \frac{7}{2}Nk_B \tag{21.3.18}$$

2. 低温近似下

$$\begin{aligned} C_V &= C_V^{t} + C_V^{v} + C_V^{r} \\ &= \frac{3}{2}Nk_B + 12Nk_B\left(\frac{T_c^r}{T}\right)^2 \exp\left(-2\frac{T_c^r}{T}\right) \\ &\quad + Nk_B\left(\frac{T_c^v}{T}\right)^2 \exp\left(-\frac{T_c^v}{T}\right) \approx \frac{3}{2}Nk_B \end{aligned} \tag{21.3.19}$$

可见在低温下，双原子分子的定容热容量主要是平动自由度的贡献，这是因为在低温下分子热运动能量 k_BT 不足以激发转动和振动，使它们参与热运动，因而不吸收热量，故对热容量的贡献很小. 必须说明：转动与振动的高温条件相差很大，以 CO 气体为例，$T_c^r \approx 10\text{K}$，而 $T_c^v \approx 3000\text{K}$. 因此在常温下，转动可用经典处理，而振动必须用量子处理.

对原子数超过 2 的多原子分子，设原子数为 s，则有 $3s$ 个自由度，其中 3 个为质心平动自由度、3 个为整体绕质心转动的自由度，余下的 $(3s-6)$ 个自由度为分子中各原子之间的相对振动，可用简正振动模式来描述.

如果双原子分子由相同的两个原子组成，必须考虑微观粒子的全同性质. 以 H_2 为例. 由 17.4 节讨论，H_2 的振动能级不受全同性的影响，而转动与全同性有关. H_2 分子由处于自旋单态 $(S=0)$ 的仲氢 $(l=\text{偶数})$ 和处于自旋三重态 $(S=1)$ 的正氢 $(l=\text{奇数})$ 组成. 正氢和仲氢的配分函数分别为

$$Z_{\text{仲}}^r = \sum_{l=\text{偶}} (2l+1)\exp\left[-\beta\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\right] \tag{21.3.20}$$

$$Z_{\text{正}}^r = \sum_{l=\text{奇}} (2l+1)\exp\left[-\beta\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\right] \tag{21.3.21}$$

因为自然界中正氢与仲氢分子数比为 3∶1，故氢分子对转动的贡献为

$$C_V^r = \frac{1}{4}[C_V^r]_{\text{仲}} + \frac{3}{4}[C_V^r]_{\text{正}} \tag{21.3.22}$$

这样计算的结果与实验一致. 上式相当于取氢分子的配分函数为

$$Z^r = [(Z_{\text{仲}}^r)(Z_{\text{正}}^r)^3]^{\frac{1}{4}} \tag{21.3.23}$$

能量均分定理：处于温度为 T 的平衡态的经典系统，单粒子能量中每一个平方项的平均值等于 $k_BT/2$. 设单粒子能量是广义动量和广义坐标的二次函数且只有平方项

$$\varepsilon(p_\alpha, q_\alpha) = \frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{f}[a_\alpha p_\alpha^2 + b_\alpha q_\alpha^2] \tag{21.3.24}$$

其中 a_α 可以是广义坐标 q_α 的函数，但 b_α 一般不可能是广义动量的函数. 粒子具有

能量$\varepsilon(p_\alpha,q_\alpha)$的概率分布为

$$\rho(q_\alpha,p_\alpha)=\frac{1}{Z}\exp[-\beta\varepsilon(q_\alpha,p_\alpha)] \tag{21.3.25}$$

故粒子的平均能量为

$$\bar{\varepsilon}=\frac{1}{Z}\int\varepsilon(q_\alpha,p_\alpha)\exp[-\beta\varepsilon(q_\alpha,p_\alpha)]\frac{\mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2\cdots\mathrm{d}q_r\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\cdots\mathrm{d}p_r}{(2\pi\hbar)^r} \tag{21.3.26}$$

首先看广义动量一个平方项的贡献

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\int a_\alpha p_\alpha^2\exp\left(-\frac{1}{2}\beta a_\alpha p_\alpha^2\right)\mathrm{d}p_\alpha\\&=\left[-\frac{p_\alpha}{2\beta}\exp\left(-\frac{1}{2}\beta a_\alpha p_\alpha^2\right)\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}+\frac{1}{2\beta}\int\exp\left(-\frac{1}{2}\beta a_\alpha p_\alpha^2\right)\mathrm{d}p_\alpha\\&=\frac{1}{2\beta}\int\exp\left(-\frac{1}{2}\beta a_\alpha p_\alpha^2\right)\mathrm{d}p_\alpha\end{aligned}$$

同样可得到广义坐标一个平方项的贡献为

$$\frac{1}{2}\int b_\alpha q_\alpha^2\exp\left(-\frac{1}{2}\beta b_\alpha q_\alpha^2\right)\mathrm{d}q_\alpha=\frac{1}{2\beta}\int\exp\left(-\frac{1}{2}\beta b_\alpha q_\alpha^2\right)\mathrm{d}q_\alpha \tag{21.3.27}$$

故粒子的平均能量为

$$\bar{\varepsilon}=\sum_{\alpha=1}^{f}\left(\frac{1}{2}k_\mathrm{B}T+\frac{1}{2}k_\mathrm{B}T\right) \tag{21.3.28}$$

即式(21.3.24)中每一个平方项对平均能量的贡献为$k_\mathrm{B}T/2$. 对双原子分子组成的理想气体,单粒子的平动能量为

$$\varepsilon^\mathrm{t}=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2) \tag{21.3.29}$$

故$\bar{\varepsilon}^\mathrm{t}=3k_\mathrm{B}T/2$;经典转动能量为

$$\varepsilon^\mathrm{r}=\frac{1}{2I}\left(p_\vartheta^2+\frac{1}{\sin^2\vartheta}p_\varphi^2\right) \tag{21.3.30}$$

故$\bar{\varepsilon}^\mathrm{r}=k_\mathrm{B}T$,而经典振动能量为

$$\varepsilon^\mathrm{v}=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2 \tag{21.3.31}$$

故$\bar{\varepsilon}^\mathrm{v}=k_\mathrm{B}T$. 因此每个分子的总平均能量为$\bar{\varepsilon}=7k_\mathrm{B}T/2$,与式(21.3.18)的结论是一致的. 显然能量均分定理只有在高温时才成立,即忽略量子效应.

21.4 声子系统和固体的定容热容量

固体中相邻离子的距离为10^{-8}cm量级,离子间存在很强的相互作用力. 在这一作用力下,各离子有一定的平衡位置,离子在其平衡位置附近作微振动. 设固体有N个离子,每个离子有3个自由度,则整个固体的自由度为$3N$个. 设每个自由

度偏离平衡位置的位移为 $u_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,3N)$，相应的动量为 $p_\alpha(\alpha=1,2,\cdots,3N)$，则整个固体系统的 Hamilton 函数为

$$H=\sum_{\alpha=1}^{3N}\frac{p_\alpha^2}{2m}+\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^{3N}a_{\alpha\beta}u_\alpha u_\beta \tag{21.4.1}$$

由 13.3 节讨论，总可以找到适当的坐标变换，使 Hamilton 函数在简正坐标内对角化成正则形式

$$H=\frac{1}{2}\sum_{\alpha=1}^{3N}(P_\alpha^2+\omega_\alpha^2Q_\alpha^2) \tag{21.4.2}$$

上式量子化后即为

$$\sum_{\alpha=1}^{3N}\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial Q_\alpha^2}+\frac{1}{2}\omega_\alpha^2Q_\alpha\right)\psi=E\psi \tag{21.4.3}$$

因此固体中离子的振动可看成 $3N$ 个独立的谐振子，每个谐振子具有能级

$$\varepsilon_\alpha=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_\alpha\quad(n=0,1,2,\cdots;\alpha=1,2,\cdots,3N) \tag{21.4.4}$$

由式(21.3.15)，每个谐振子对固体内能的贡献为

$$U_\alpha=\frac{1}{2}\hbar\omega_\alpha+\frac{\hbar\omega_\alpha}{\exp(\beta\hbar\omega_\alpha)-1} \tag{21.4.5}$$

故 $3N$ 个谐振子对固体内能的贡献为

$$U^{\mathrm{v}}=\sum_{\alpha=1}^{3N}U_\alpha=\sum_{\alpha=1}^{3N}\left[\frac{1}{2}\hbar\omega_\alpha+\frac{\hbar\omega_\alpha}{\exp(\beta\hbar\omega_\alpha)-1}\right] \tag{21.4.6}$$

相应的定容热容量为

$$C_V=\left(\frac{\partial U^{\mathrm{v}}}{\partial T}\right)_V=k_{\mathrm{B}}\sum_{\alpha=1}^{3N}\frac{(\beta\hbar\omega_\alpha)^2\exp(\beta\hbar\omega_\alpha)}{[\exp(\beta\hbar\omega_\alpha)-1]^2} \tag{21.4.7}$$

严格知道这 $3N$ 个振动频率是困难的，设简正振动频率连续分布，它的振动谱为 $g(\omega)$，那么(21.4.7)式可化为积分

$$C_V=k_{\mathrm{B}}\int_0^{\omega_{\max}}\frac{(\beta\hbar\omega)^2\exp(\beta\hbar\omega)}{[\exp(\beta\hbar\omega)-1]^2}g(\omega)\mathrm{d}\omega \tag{21.4.8}$$

其中 $g(\omega)$ 称为**声子谱密度**，$\omega_{\max}$ 是谐振子的最大频率，由固体系统的自由度数 $3N$ 决定，即满足

$$\int_0^{\omega_{\max}}g(\omega)\mathrm{d}\omega=3N \tag{21.4.9}$$

有了正确的声子谱密度，就可以由式(21.4.8)计算固体的热容量，但是严格得到 $g(\omega)$ 必须求解复杂的晶格动力学方程. 下面介绍两个简单模型.

Einstein 模型：假设 $3N$ 个谐振子的振动频率相同且为 ω_{E}，相当于取 $g(\omega)=3N\delta(\omega-\omega_{\mathrm{E}})$. 于是固体的热容量为

$$C_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V=3Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T_{\mathrm{E}}}{T}\right)^2\frac{\exp(T_{\mathrm{E}}/T)}{[\exp(T_{\mathrm{E}}/T)-1]^2} \tag{21.4.10}$$

其中 $T_{\mathrm{E}}=\hbar\omega_{\mathrm{E}}/k_{\mathrm{B}}$ 称为 **Einstein 特征温度**，特征温度一般很高，如对金刚石 $T_{\mathrm{E}}\sim 1320\mathrm{K}$. 高温区($T\gg T_{\mathrm{E}}$)，取

$$\exp\left(\frac{T_{\mathrm{E}}}{T}\right)-1\sim\frac{T_{\mathrm{E}}}{T} \tag{21.4.11}$$

故 $C_V\sim 3Nk_{\mathrm{B}}$，这一结论与实验一致；低温区($T\ll T_{\mathrm{E}}$)区

$$\exp\left(\frac{T_{\mathrm{E}}}{T}\right)-1\sim\exp\left(\frac{T_{\mathrm{E}}}{T}\right) \tag{21.4.12}$$

故 $C_V=3Nk_{\mathrm{B}}\,(T_{\mathrm{E}}/T)^2\exp(-T_{\mathrm{E}}/T)\to 0$. 但这一结论与实验不一致，其根源在于 Einstein 假设 $3N$ 个谐振子的振动频率相同过于简单.

Debye 模型：把固体当作各向同性的连续介质，把声子系统当作弹性波场来处理. 弹性波有二个横波模式和一个纵波模式，声波振动频率 ω 与波矢量 $\boldsymbol{k}$ 分别与声子的能量 ε 和动量 $\boldsymbol{p}$ 相对应，即

$$\varepsilon=\hbar\omega;\quad \boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k} \tag{21.4.13}$$

利用关系 $\omega=2\pi c/\lambda=kc$，得到能量与动量的关系：$\varepsilon=cp$(其中 c 是横波或纵波声速，即 c_{l} 或 c_{t}). 因此可把声子系统当作独立粒子系统来处理. 由式(21.2.32)得到声子的态密度为

$$g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon=\frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3}p^2\mathrm{d}p=\frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\varepsilon^2}{c^3}\mathrm{d}\varepsilon \tag{21.4.14}$$

故态密度可表示为

$$g(\omega)\mathrm{d}\omega=\frac{4\pi V}{(2\pi)^3}\frac{\omega^2}{c^3}\mathrm{d}\omega \tag{21.4.15}$$

由于存在两个横波模式和一个纵波模式，于是

$$g(\omega)d\omega=B\omega^2\mathrm{d}\omega \tag{21.4.16}$$

其中

$$B=\frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{1}{c_{\mathrm{l}}^3}+\frac{2}{c_{\mathrm{t}}^3}\right) \tag{21.4.17}$$

式(21.4.16)代入式(21.4.9)得到 $\omega_{\max}=(9N/B)^{1/3}$. 于是

$$C_V=9Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\int_0^{\Theta/T}\frac{y^4\exp(y)}{[\exp(y)-1]^2}\mathrm{d}y \tag{21.4.18}$$

其中 Θ 称为 Debye 温度：$\Theta=\hbar\omega_{\max}/k_{\mathrm{B}}$.

高温 $T\gg\Theta$ 时：$y\ll 1$，$\exp(y)\approx 1+y$，得到

$$C_V\approx 9Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\int_0^{\Theta/T}y^2\mathrm{d}y=3Nk_{\mathrm{B}} \tag{21.4.19}$$

低温 $T\ll\Theta$ 时：$y\gg 1$，积分上限扩展到无限

$$C_V\approx 9Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3\int_0^{\infty}\frac{y^4\exp(y)}{[\exp(y)-1]^2}\mathrm{d}y\sim T^3 \tag{21.4.20}$$

与实验基本一致. 当然，Debye 模型也是一种近似，但已经能给出定性一致的结果了.

21.5 二能级系统、负温度和核自旋

考虑一个具有两个能级 ε_1 和 $\varepsilon_2(\varepsilon_2>\varepsilon_1)$的体系，有 $N(N\gg1)$个定域(即空间位置固定)近独立的粒子组成. 设处于两个能级上的粒子数分别为 N_1 和 N_2，则

$$N_1+N_2=N;\quad N_1\varepsilon_1+N_2\varepsilon_2=E \tag{21.5.1}$$

即

$$N_1=\frac{N\varepsilon_2-E}{\varepsilon_2-\varepsilon_1};\quad N_2=\frac{E-N\varepsilon_1}{\varepsilon_2-\varepsilon_1} \tag{21.5.2}$$

体系的微观状态数由方程(21.1.1)给出为

$$\Omega=\frac{N!}{N_1!N_2!} \tag{21.5.3}$$

故体系的熵为

$$\begin{aligned}S&=k_{\mathrm{B}}\ln\Omega=k_{\mathrm{B}}(\ln N!-\ln N_1!-\ln N_2!)\\&\approx k_{\mathrm{B}}(N\ln N-N_1\ln N_1-N_2\ln N_2)\end{aligned} \tag{21.5.4}$$

由式(21.5.2)得到

$$\begin{aligned}S=k_{\mathrm{B}}\Big[&N\ln N-\Big(\frac{N\varepsilon_2-E}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\Big)\ln\Big(\frac{N\varepsilon_2-E}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\Big)\\&-\Big(\frac{E-N\varepsilon_1}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\Big)\ln\Big(\frac{E-N\varepsilon_1}{\varepsilon_2-\varepsilon_1}\Big)\Big]\end{aligned} \tag{21.5.5}$$

取 $E=\bar{E}=U$，由热力学关系

$$\frac{1}{T}=\Big(\frac{\partial S}{\partial U}\Big)_N \tag{21.5.6}$$

得到系统的温度为

$$T=\frac{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)}{k_{\mathrm{B}}}\Big[\ln\Big(\frac{N\varepsilon_2-E}{E-N\varepsilon_1}\Big)\Big]^{-1}=\frac{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)}{k_{\mathrm{B}}}\frac{1}{\ln(N_1/N_2)} \tag{21.5.7}$$

(21.5.7)式的有趣现象是：如果高能级 ε_2 上的粒子数 N_2 大于低能级 ε_1 的粒子数，即 $N_2>N_1$，那么 $T<0$，出现负的温度！由式(21.5.6)，负温度意味着：随着系统能量的上升，熵反而减少.

为了说明负温度的意义，考虑两个系统的热接触：系统 1，$T_1<0$；系统 2，$T_2>0$. 如果热量 Q 从系统 2 流到系统 1，那么总的熵变化为

$$\Delta S=\frac{Q_1}{T_1}+\frac{Q_2}{T_2}=\frac{Q}{T_1}-\frac{Q}{T_2}<0 \tag{21.5.8}$$

而这与孤立系统趋向热平衡的熵增加原理矛盾！如果热量 Q 从系统 1 流到系统 2，那么总的熵变化为

$$\Delta S=\frac{Q_1}{T_1}+\frac{Q_2}{T_2}=-\frac{Q}{T_1}+\frac{Q}{T_2}>0 \tag{21.5.9}$$

这是热力学允许的. 因此热量必定是从负温度系统流向正温度系统. 这意味着负温度系统的温度更“高”，它具有更多能量. 由“冷”到“热”的次序为

$$+0\mathrm{K},\cdots,+300\mathrm{K},\cdots,\pm\infty\mathrm{K},\cdots,-300\mathrm{K},\cdots,-0\mathrm{K} \tag{21.5.10}$$

$\pm\infty$K 是相同的温度. 如果把+300K 的物体与−300K 的物体相接触，达到热平衡后的共同温度是$\pm\infty$K，而不是 0K. 显然一个系统不可能经准静态过程由正温状态变到负温状态.

一个能实现负温状态的系统是核自旋系统. 假定核自旋的量子数为 1/2，在外磁场 B 下，由于磁矩可与外磁场反向和同向，能量有两个可能值$\pm q\hbar B/2m\equiv\pm\varepsilon$，即 $\varepsilon_1=-\varepsilon$；$\varepsilon_2=\varepsilon$. 由式(21.5.5)，核自旋系统的熵为

$$S=k_BN\Big[\ln 2-\frac{1}{2}\Big(1-\frac{E}{N\varepsilon}\Big)\ln\Big(1-\frac{E}{N\varepsilon}\Big)-\frac{1}{2}\Big(1+\frac{E}{N\varepsilon}\Big)\ln\Big(1+\frac{E}{N\varepsilon}\Big)\Big] \tag{21.5.11}$$

当 $E=-N\varepsilon$ 时，即 N 个磁矩都沿磁场方向，$S=0$，此时对应的温度为零($T=0$)，系统能量最低；当温度上升，磁矩反向(具有能量$+\varepsilon$)的数目逐渐增加，因而系统的内能和熵增加，当温度上升到 $T=+\infty$时，正向磁矩和反向磁矩的数目相等，都为 $N/2$，系统的能量为零，而熵极大($S=k_B\ln 2^N$)；

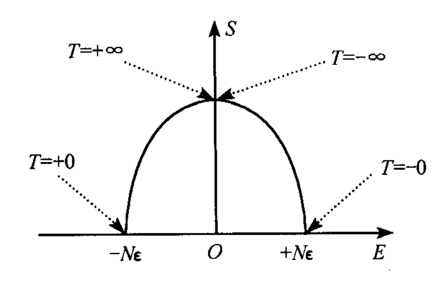


图 21.5.1 二能级系统熵与能量的关系

当式(21.5.11)中能量 E 由零开始增加时(即反向磁矩的数目大于正向磁矩的数目)，S 反而减小. 由式(21.5.6)，此时对应于负的温度(斜率为负)；当磁矩全部反向时，$E=N\varepsilon$，而 $S=0$. S 随 E 变化的曲线如图 21.5.1，曲线的斜率为温度的倒数. 可见，随着系统能量从$-N\varepsilon\to0\to+N\varepsilon$，温度的变化规律为+0K→$\pm\infty$K→−0K.

以上我们介绍了二能级系统存在负温度. 事实上，只要粒子的能级存在上限，都可能存在负温度. 一般的系统不可能满足这个条件，如具有平动、振动和转动自由度时，粒子的能级就不存在上限，粒子占据的能级越高，系统的能量和熵就越大，熵是能量的单调增函数，温度恒正. 此外，负温度系统必须与任何正温度系统隔绝，否则负温度系统由于放出热量而不可能稳定存在.

习 题 21

21.1 根据公式

$$p=-\sum_i n_i\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial V}$$

证明对非相对论粒子

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}\left(\frac{2\pi\hbar}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

压强与能量的关系

$$p = \frac{2}{3}\frac{U}{V}.$$

（提示：$L=V^{1/3}$，该公式与分布无关）

21.2　上题中，证明对于极端相对论粒子

$$\varepsilon = cp = c\,\frac{2\pi\hbar}{L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

压强与能量的关系

$$p = \frac{1}{3}\frac{U}{V}.$$

（提示：$L=V^{1/3}$，该公式与分布无关）

21.3　求单原子分子组成的理想气体的熵和自由能，并讨论其广延性.（提示：直接利用公式(21.2.21)和(21.2.22)）

答案：$S=\frac{3}{2}Nk_B\ln T+Nk_B\ln\frac{V}{N}+\frac{3}{2}Nk_B\left[\frac{5}{3}+\ln\left(\frac{2\pi mk_B}{(2\pi\hbar)^2}\right)\right].$

21.4　求单原子分子组成的理想气体的化学势，并讨论其强度性，说明理想气体化学势小于零.（提示：利用关系 $\mu=\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}=-k_BT\ln\frac{Z}{N}$）

答案：$\mu=k_BT\ln\left[\frac{N}{V}\left(\frac{(2\pi\hbar)^2}{2\pi mk_BT}\right)^{3/2}\right]$，$\frac{N}{V}\left(\frac{(2\pi\hbar)^2}{2\pi mk_BT}\right)^{3/2}\ll 1.$

21.5　利用经典的转动能量表达式，直接求配分函数.（提示：转动的 Hamilton 函数为

$$\varepsilon^r = \frac{1}{2I}\left(p_\vartheta^2 + \frac{1}{\sin^2\vartheta}p_\varphi^2\right)$$

广义坐标和广义动量为(θ,φ)、(p_ϑ,p_φ)，配分函数为

$$Z^r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}d\vartheta\int_{-\infty}^{\infty}dp_\vartheta\int_{-\infty}^{\infty}dp_\varphi\exp(-\beta\varepsilon)）$$

答案：$Z^r=\frac{8\pi^2 I}{(2\pi\hbar)^2}k_BT.$

21.6　考虑一个理想晶格模型，它有 N 个格点和 N 个空隙位置（即格点之间的间隙，原子也可以占据在这样的位置），E 是把一个原子从格点移到空隙位置上所需要的能量，用 n 表示平衡时占据空隙位的原子数.（1）求系统的内能；（2）求系统的熵，假定 $n\gg1$；（3）温度为 T 时，求 n 的表达式.（提示：（1）设原子全部在格点上时，系统的内能为 U_0，则 $U=U_0+nE$；（2）从 N 个格点中取出 n 个原子有 C_N^n

种取法，放到 N 个空隙位置又有 C_N^n 种放法，故微观状态数为

$$W(n)=\left[\frac{N!}{n!(N-n)!}\right]^2$$

熵为 $S=k_B\ln W(n)$；(3) 温度与体积一定时，平衡态系统的自由能极小，然后求 n 的表达式)

答案：(1) $U=U_0+nE$；

(2) $S=2k_B[N\ln N-n\ln n-(N-n)\ln(N-n)]$；

(3) 由 $F=U-TS$ 极小得到

$$n=\frac{N}{\exp(-\beta E/2)+1}$$

21.7 单原子分子经典理想气体的粒子数、体积和温度分别为 N、V 和 T，每个原子除平动自由度外还有两个内部能级 $\varepsilon_1=0$ 和 $\varepsilon_2=\Delta$. (1) 求内能；(2) 压强. (提示：每个原子的能量 $\varepsilon=\varepsilon^t+\varepsilon^n$，其中 ε^t 为质心平动能量. 总配分函数 $Z=Z^tZ^n$，平动部分

$$Z^t=\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}(2\pi mk_BT)^{3/2}$$

内部自由度部分 $Z^n=1+\exp(-\beta\Delta)$)

答案：(1) $U=\frac{3}{2}k_BT+\frac{N\Delta}{1+\exp(\beta\Delta)}$；(2) $p=Nk_BT/V$(与内部自由度无关).

21.8 N 个独立粒子构成的材料，置于弱外场 H 中，每个粒子可具有沿着磁场方向的磁矩 $m\mu$(其中 $m=J,J-1,\cdots,-J+1,-J$，J 为整数，μ 为常量)，体系的温度为 T. (1) 求这个体系的配分函数；(2) 计算材料的平均磁化强度；(3) 求高温下的磁化强度.

答案：(1) $Z=\sum\limits_{m=-J}^{J}\exp(m\mu H\beta)=\sinh\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)\beta\mu H\right]\Big/\sinh\left[\frac{1}{2}\beta\mu H\right]$；

(2)
$$\begin{aligned}\overline{M}&=-\left(\frac{\partial F}{\partial H}\right)_T=Nk_BT\frac{\partial\ln Z}{\partial H}\\&=\frac{N\mu}{2}\left[(2J+1)\coth\frac{(2J+1)\mu H}{2k_BT}-\coth\frac{\mu H}{2k_BT}\right];\end{aligned}$$

(3) $\overline{M}=\frac{1}{3}NJ(J+1)\frac{\mu^2H}{k_BT}$；注意利用 $\coth x\approx\frac{1}{x}\left(1+\frac{x^2}{3}\right)(x\ll1)$.

第 22 章 准独立粒子系的量子统计

把 Boltzmann 统计应用于极低温或低温的准独粒子系统时，理论结果与实验相差很大. 例如，利用 Boltzmann 统计，低温下金属中电子气体对热容量的贡献应该为常数，而实验测量比理论预言小得多且比热与温度成线性关系：$C_V \sim k_B T$. 这样的差别说明 Bolzmann 统计的局限性. Boltzmann 统计的根本缺点在于认为微观粒子是可分辨的且每个微观态上占据的粒子数不受限制. 根据量子力学，微观粒子是全同的，不可分辨. 每个微观态上占据的粒子数与它的统计特性有关，必须遵从两种统计：**Bose 统计**和 **Fermi 统计**.

22.1 Fermi 统计和 Bose 统计

设一个体积、能量和粒子数都给定的准独立粒子系统，单粒子能级和相应的简并度为$\{\varepsilon_i, g_i\}$$(i=1,2,\cdots)$，$N$ 个粒子在单粒子能级上的分布为$\{n_i\}$$(i=1,2,\cdots)$. 假定微观粒子遵从 Fermi 统计或 Bose 统计，我们来求任意一种分布$\{n_i\}$所包含的微观状态数.

首先考虑微观粒子遵从 Fermi 统计，即每个量子态至多只能有一个粒子占据. 显然，因为有 n_i 个粒子占据能级 ε_i，故这个能级的简并度 g_i 必须大于或等于粒子数 n_i，即 $g_i \geqslant n_i$. 微观状态的计算变成：g_i 个量子态中任选 n_i 个量子态的可能取法，它等于

$$C_{n_i}^{g_i} = \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \tag{22.1.1}$$

每种取法即相当于 n_i 个粒子的一个状态. 于是 Fermi 子系统在某一种分布$\{n_i\}$下的微观状态数为

$$\Omega^F(\{n_i\}) = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \tag{22.1.2}$$

对微观粒子遵从 Bose 统计的系统，每个量子态占据的粒子数没有限制，n_i 个粒子占据 g_i 个量子态的方式计算可这样考虑：把 g_i 个量子态与 n_i 个粒子放在一起，如图 22.1.1，方格表示量子态，共有 g_i 个方格；圆表示粒子，共有 n_i 个圆. 方格右边的圆表示这个方格的粒子数，如第一个方格有 2 个粒子，第二个方格有 0 个粒子，等等. 显然，图 22.1.1 中的任何一种排列就是一个微观状态. 因左边第一个必定是方格（这样才有意义），故共有$(g_i + n_i - 1)$个方格和圆参与排列，排列的总数

为$(g_i+n_i-1)!$. 但因为粒子是全同的，并且量子态也可看成全同的，应除去粒子之间的交换数$n_i!$和量子态之间的交换数$(g_i-1)!$. 故n_i个粒子占据能级ε_i(简并度为g_i)的可能状态数为

$$\frac{(g_i+n_i-1)!}{n_i!(g_i-1)!}\equiv C_{n_i}^{g_i+n_i-1} \tag{22.1.3}$$

□○○□□○○○□○○○□○○○

图 22.1.1　Bose 系统微观状态数的计算

于是 Bose 子系统在某一种分布$\{n_i\}$下的微观状态数为

$$\Omega^{\mathrm{B}}(\{n_i\})=\prod_i\frac{(g_i+n_i-1)!}{n_i!(g_i-1)!} \tag{22.1.4}$$

与 Boltzmann 统计一样，仍然在约束条件下

$$\sum_i n_i=N;\quad \sum_i\varepsilon_i n_i=E \tag{22.1.5}$$

求最可几分布. 式(22.1.2)和(22.1.4)取对数并且利用$\ln n_i!\approx n_i(\ln n_i-1)$，得到

$$\begin{aligned}\ln\Omega^{\mathrm{F}}(\{n_i\})&=\sum_i[g_i\ln g_i-n_i\ln n_i-(g_i-n_i)\ln(g_i-n_i)]\\ \ln\Omega^{\mathrm{B}}(\{n_i\})&=\sum_i[(g_i+n_i-1)\ln(g_i+n_i-1)\\ &\quad-n_i\ln n_i-(g_i-1)\ln(g_i-1)]\end{aligned} \tag{22.1.6}$$

一般$g_i\gg1$，$g_i-1\approx g_i$、$g_i+n_i-1\approx g_i+n_i$，故上二式可合并

$$\ln\Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\})=\sum_i[(\pm g_i\ln g_i-n_i\ln n_i+(n_i\mp g_i)\ln(g_i\mp n_i)] \tag{22.1.7}$$

上式的一阶变分为

$$\begin{aligned}\delta\ln\Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\})&=\sum_i[-\delta n_i\ln n_i-\delta n_i+\delta n_i\ln(g_i\mp n_i)+\delta n_i]\\ &=\sum_i[-\ln n_i+\ln(g_i\mp n_i)]\delta n_i\end{aligned} \tag{22.1.8}$$

约束条件的变分为

$$\sum_i\delta n_i=0;\quad \sum_i\varepsilon_i\delta n_i=0 \tag{22.1.9}$$

根据 Lagrange 乘子法，我们得到

$$\delta\ln\Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\})-\alpha\sum_i\delta n_i-\beta\sum_i\varepsilon_i\delta n_i=0 \tag{22.1.10}$$

即

$$\sum_i\{[-\ln n_i+\ln(g_i\mp n_i)]-\alpha-\beta\varepsilon_i\}\delta n_i=0 \tag{22.1.11}$$

选择适当的 Lagrange 乘子α和β，使非独立变分前的系数为零，而独立变分前的系

数必须为零，故

$$[-\ln n_i+\ln(g_i\mp n_i)]-\alpha-\beta\varepsilon_i=0 \tag{22.1.12}$$

于是得到最可几分布为

$$n_i^{\mathrm{F,B}}=\frac{g_i}{\exp(\alpha+\beta\varepsilon_i)\pm1} \tag{22.1.13}$$

22.2　量子统计中的热力学关系和熵

与 Boltzmann 统计同样讨论，可选择 $\beta=1/(k_{\mathrm{B}}T)$. 与配分函数 Z 对应，引入**巨配分函数 Ξ** 如下

$$\Xi^{\mathrm{F,B}}=\prod_i[1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)]^{\pm g_i} \tag{22.2.1}$$

取对数得

$$\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}=\sum_i(\pm g_i)\ln[1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)] \tag{22.2.2}$$

于是系统的内能函数为

$$U^{\mathrm{F,B}}=\sum_i\varepsilon_i n_i^{\mathrm{F,B}}=\sum_i\frac{g_i\varepsilon_i}{\exp(\alpha+\beta\varepsilon_i)\pm1}=-\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial\beta} \tag{22.2.3}$$

系统的总粒子数为

$$N^{\mathrm{F,B}}=\sum_i n_i^{\mathrm{F,B}}=\sum_i\frac{g_i}{\exp(\alpha+\beta\varepsilon_i)\pm1}=-\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial\alpha} \tag{22.2.4}$$

系统的广义力为

$$Y_k=\sum_i n_i^{\mathrm{F,B}}\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial y_k}=\sum_i\frac{g_i}{\exp(\alpha+\beta\varepsilon_i)\pm1}\frac{\partial\varepsilon_i}{\partial y_k}=-\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial y_k} \tag{22.2.5}$$

特别是对 p-V 系统，有关系

$$p=\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial V} \tag{22.2.6}$$

由式(21.2.8)，可逆微变化中熵变化

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}S&=\mathrm{d}\left(\frac{U}{T}\right)-k_{\mathrm{B}}\left(\sum_i n_i\varepsilon_i\mathrm{d}\beta+\beta\sum_i n_i\mathrm{d}\varepsilon_i\right)\\
&=\mathrm{d}\left(\frac{U}{T}\right)-k_{\mathrm{B}}\left(\sum_i\frac{g_i\varepsilon_i}{\exp(\alpha+\beta\varepsilon_i)\pm1}\mathrm{d}\beta+\beta\sum_i\frac{g_i}{\exp(\alpha+\beta\varepsilon_i)\pm1}\mathrm{d}\varepsilon_i\right)\\
&=\mathrm{d}\left(\frac{U}{T}\right)+k_{\mathrm{B}}\left[\mathrm{d}(\ln\Xi^{\mathrm{F,B}})-\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial\alpha}\mathrm{d}\alpha\right]\\
&=\mathrm{d}\left(\frac{U}{T}\right)+k_{\mathrm{B}}\mathrm{d}(\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}+\alpha N^{\mathrm{F,B}})=\mathrm{d}\left(\frac{U}{T}+k_{\mathrm{B}}\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}+\alpha k_{\mathrm{B}}N^{\mathrm{F,B}}\right)
\end{aligned}$$

故系统的熵为

$$S-S_0=\frac{U}{T}+k_B\ln\Xi^{F,B}+\alpha k_B N^{F,B} \tag{22.2.7}$$

利用式(22.2.3)得到

$$S-S_0=\sum_i\left(\frac{\varepsilon_i}{T}\right)n_i^{F,B}+k_B\ln\Xi^{F,B}+\alpha k_B N^{F,B} \tag{22.2.8}$$

而由方程(22.1.13)

$$\frac{\varepsilon_i}{T}=k_B\left[\ln\left(\frac{g_i\mp n_i^{F,B}}{n_i^{F,B}}\right)-\alpha\right] \tag{22.2.9}$$

另一方面

$$\begin{aligned} n_i^{F,B}&=\frac{(\pm g_i)[1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)-1]}{1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)} \\ &=(\pm g_i)\left[1-\frac{1}{1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)}\right] \end{aligned} \tag{22.2.10}$$

即

$$\ln[1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)]=\ln g_i-\ln(g_i\mp n_i^{F,B}) \tag{22.2.11}$$

代入式(22.2.8)得到

$$\begin{aligned} S-S_0&=k_B\sum_i\left[\ln\left(\frac{g_i\mp n_i^{F,B}}{n_i^{F,B}}\right)\right]n_i^{F,B}+k_B\sum_i(\pm g_i)\ln\left[\frac{g_i}{(g_i\mp n_i^{F,B})}\right] \\ &=k_B\sum_i[\pm g_i\ln g_i-n_i^{F,B}\ln n_i^{F,B}+(n_i^{F,B}\mp g_i)\ln(g_i\mp n_i^{F,B})] \end{aligned} \tag{22.2.12}$$

比较上式与式(22.1.7)，显然有关系

$$S-S_0=k_B\ln\Omega^{F,B}(\{n_i\}) \tag{22.2.13}$$

上式与式(21.2.19)类似. 为了确定上式中的积分常数 S_0，我们来看极限情况. 当 $\exp(\alpha)\gg1$ 且单粒子基态能量 $\varepsilon_0>0$ 时，Fermi 分布或 Bose 分布近似为

$$n_i^{F,B}=g_i\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i) \tag{22.2.14}$$

与 Boltzmann 分布一样. 尽管分布 $\{n_i\}$ 相同，但微观状态数是不一样的. 因 $\exp(\alpha)\gg1$，故 $n_i^{F,B}/g_i\ll1$，对 Fermi 分布和 Bose 分布分别有近似关系

$$\begin{aligned} \Omega^F(\{n_i\})&=\prod_i\frac{g_i!}{n_i!(g_i-n_i)!} \\ &=\prod_i\frac{g_i(g_i-1)(g_i-2)\cdots(g_i-n_i+1)}{n_i!}\approx\prod_i\frac{g_i^{n_i}}{n_i!} \end{aligned} \tag{22.2.15}$$

以及

$$\Omega^B(\{n_i\})=\prod_i\frac{(g_i+n_i-1)}{n_i!(g_i-1)!}$$

$$= \prod_i \frac{(g_i + n_i - 1)(g_i + n_i - 2)\cdots g_i}{n_i!} \approx \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} \tag{22.2.16}$$

上二式与 Boltzmann 微观状态数方程(21.1.1)比较，显然有关系

$$\Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\}) \approx \prod_i \frac{g_i^{n_i}}{n_i!} = \frac{\Omega^{\mathrm{M}}(\{n_i\})}{N!} \tag{22.2.17}$$

Boltzmann 统计中假定微观粒子是可分辨的，因此在计算微观状态数时多数了 $N!$，这显然是不正确的. 正确的应该是 Fermi 统计或 Bose 统计. 式(21.2.20)中，$N!$ 是作为积分常数加进去的. 而在 Fermi 统计或 Bose 统计中已没有必要. 故可以直接令式(22.2.13)中积分常数为零，即

$$S = k_{\mathrm{B}} \ln \Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\}) \tag{22.2.18}$$

为了分析 α 的意义，考虑粒子数可变的情况，热力学第一定律为

$$\mathrm{d}U = \bar{\mathrm{d}}W + \bar{\mathrm{d}}Q + \mu \mathrm{d}N \tag{22.2.19}$$

而内能变化为

$$\begin{aligned} \mathrm{d}U &= \mathrm{d}\left(\sum_i n_i \varepsilon_i\right) = \sum_i n_i \mathrm{d}\varepsilon_i + \sum_i \varepsilon_i \mathrm{d}n_i \\ &= \bar{\mathrm{d}}W + \sum_i \varepsilon_i \mathrm{d}n_i \end{aligned} \tag{22.2.20}$$

故在粒子数可变的情况，热量变化为

$$\bar{\mathrm{d}}Q = \sum_i \varepsilon_i \mathrm{d}n_i - \mu \sum_i \mathrm{d}n_i = \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \mathrm{d}n_i \tag{22.2.21}$$

故可逆微变化中熵变化为

$$\mathrm{d}S = \frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T} = \frac{1}{T} \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \mathrm{d}n_i \tag{22.2.22}$$

另一方面，由式(22.2.18)

$$\mathrm{d}S = k_{\mathrm{B}} \mathrm{d}\ln \Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\}) = k_{\mathrm{B}} \sum_i \ln \frac{(g_i \mp n_i)}{n_i} \mathrm{d}n_i \tag{22.2.23}$$

利用式(22.2.11)得

$$\begin{aligned} \mathrm{d}S &= k_{\mathrm{B}} \mathrm{d}\ln \Omega^{\mathrm{F,B}}(\{n_i\}) \\ &= k_{\mathrm{B}} \sum_i \left\{ \ln \frac{g_i}{n_i} - \ln[1 \pm \exp(-\alpha - \beta\varepsilon_i)] \right\} \mathrm{d}n_i \\ &= k_{\mathrm{B}} \sum_i \ln[\exp(\alpha + \beta\varepsilon_i)] \mathrm{d}n_i \\ &= k_{\mathrm{B}} \sum_i (\alpha + \beta\varepsilon_i) \mathrm{d}n_i = \frac{1}{T} \sum_i (k_{\mathrm{B}} T \alpha + \varepsilon_i) \mathrm{d}n_i \end{aligned} \tag{22.2.24}$$

上式与式(22.2.22)比较得

$$\alpha = -\beta\mu \tag{22.2.25}$$

最后我们得到 Fermi 统计和 Bose 统计表达式

$$n_i^{\mathrm{F,B}} = \frac{g_i}{\exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)] \pm 1} \tag{22.2.26}$$

由热力学关系(22.2.3)、(22.2.4)和(22.2.5)，只要知道了系统的巨配分函数 Ξ 的对数，就可求得所有的热力学关系. 注意：巨配分函数 Ξ 以 α、β 和广义位移 y_k 为独立变量.

例 22.2.1 弱简并量子气体.

解： 设组成气体的原子是单原子分子，只考虑平动自由度，巨配分函数 Ξ 的对数为

$$\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}=\sum_i(\pm g_i)\ln[1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon_i)] \tag{22.2.27}$$

原子限制在宏观大小的容器内运动，能级可看成连续变化，上式中求和可用积分代替，能态密度由式(21.2.33)给出，代入上式得到

$$\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}=\pm\frac{2\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}VJ\int_0^{\infty}\sqrt{\varepsilon}\ln[1\pm\exp(-\alpha-\beta\varepsilon)]\mathrm{d}\varepsilon \tag{22.2.28}$$

其中 J 是考虑了原子自旋引起的简并：$J=(2S+1)$(S 是自旋量子数). 考虑弱简并量子气体，即满足 $\exp(\alpha)\gg1$(其意义在后面讨论). 当 $\exp(-\alpha)\ll1$ 时，利用展开公式

$$\ln(1\pm x)=\pm\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}(\mp1)^{n-1}x^n \tag{22.2.29}$$

式(22.2.28)化成

$$\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}=\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{3/2}V\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}(\mp1)^{n-1}\exp(-n\alpha)$$

$$\cdot\int_0^{\infty}\exp(-n\beta x^2)2x^2\mathrm{d}x\equiv\left[\frac{2\pi m}{\beta(2\pi\hbar)^2}\right]^{3/2}JVf(\alpha) \tag{22.2.30}$$

其中

$$f(\alpha)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{5/2}}(\mp1)^{n-1}\exp(-n\alpha) \tag{22.2.31}$$

由方程(22.2.3)和(22.2.4)得到内能函数和总粒子数分别为

$$U^{\mathrm{F,B}}=-\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial\beta}=\frac{3}{2\beta}\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}=-\frac{3N^{\mathrm{F,B}}}{2\beta}\frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)} \tag{22.2.32}$$

$$N^{\mathrm{F,B}}=-\frac{\partial\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}}{\partial\alpha}=-\frac{f'(\alpha)}{f(\alpha)}\ln\Xi^{\mathrm{F,B}} \tag{22.2.33}$$

注意：求偏导数时，α、β 和 V 是 $\ln\Xi^{\mathrm{F,B}}$ 的独立变量. 在 $\exp(-\alpha)$ 的一阶近似下，可以得到

$$N^{\mathrm{F,B}}\approx\left(\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}JV\exp(-\alpha) \tag{22.2.34}$$

$$U^{\mathrm{F,B}}\approx\frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T\left[1\pm\frac{1}{4\sqrt{2}}\frac{N}{JV}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T}\right)^{3/2}\right] \tag{22.2.35}$$

由式(21.3.10)，用 Boltzmann 统计得到的内能为 $U^{M}=3Nk_{B}T/2$. 注意：我们并没有考虑粒子之间的相互作用，故上式第二项完全是由于微观粒子全同性原理引起的量子统计关联所导致的附加内能. “±”号说明：由于量子统计关联使 Fermi 粒子之间出现等效的排斥作用而使内能增加；Bose 粒子之间则出现等效的吸引作用，使内能降低.

由式(22.2.34)，条件 $\exp(-\alpha)\ll 1$ 相当于

$$\frac{N^{F,B}}{JV}\sqrt{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right)^3}\ll 1 \tag{22.2.36}$$

或者当温度 T 满足

$$T\gg\left(\frac{N}{JV}\right)^{2/3}\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\equiv T^* \tag{22.2.37}$$

时，量子统计效应可忽略；当 $T\sim T^*$ 或者 $T\ll T^*$ 时，必须考虑量子统计效应. 显然 T^* 与粒子的质量成反比，并且与粒子数密度有关. 如氩气，原子质量为 $m=6.47\times 10^{-23}$g，当 $N/V=10^{22}\text{cm}^{-3}$时，$T^*=0.5$K，故一般温度下都可用 Boltzmann 统计. 对一般的气体，T^* 很小，量子统计效应只有在很低的温度才明显，故称为**弱简并量子气体**. 但对金属中的电子气体，电子质量为 $m=9\times10^{-29}$g，当 $N/V=10^{22}\text{cm}^{-3}$ 时，$T^*=10^3\sim10^4$K. 可见 T^* 很大，即使在常温下也必须考虑量子效应，故称为**强简并量子气体**(见下节讨论). 因此金属中的电子气体必须用 Fermi 统计来处理，除非 $N/V\sim10^{17}\text{cm}^{-3}$，如半导体的情况就可用 Boltzmann 统计.

22.3　金属中的自由电子：强简并电子气体

电子-电子之间存在长程 Coulomb 排斥作用，单就电子本身而言，独立粒子的统计方法是不能用的. 原子结合成金属后，价电子脱离原子可在整个金属内运动，形成共有电子. 失去价电子后的原子成为离子，在空间形成规则的点阵. 任何一个电子一方面排斥其他电子，同时要吸引正离子，结果造成价电子周围随时裹着一团正电荷，正电荷屏蔽了其他离子和电子产生的外电场. 所以电子-电子的长程 Coulomb 作用变成短程屏蔽 Coulomb 力. 作为第一步近似，可忽略这种短程作用，把电子看作准独立的粒子. 但此时电子已不是自由状态的“裸体”电子，而是裹着正电荷云的准电子. 注意：进一步近似必须考虑电子在周期离子阵的运动，导致所谓的能带理论，是固体物理的重要内容，本书不进一步讨论.

金属的高导电率说明了金属中“自由”电子的存在. 但如果将 Boltzmann 统计应用于“自由”电子，N 个“自由”电子对热容量的贡献为 $3Nk_B/2$，而实验结果是：除在极低温条件下，电子对热容量的贡献可以忽略，而主要是离子阵振动的贡献；在极低温下，又以电子对热容量的贡献为主且与温度成正比. 然而把 N 个“自由”

电子看作服从 Fermi 分布的准独立粒子系统，就能解决这个问题.

此外，由式(22.2.36)，以铜为例，电子数密度 $n\equiv N/V\sim 8.5\times 10^{28}/\mathrm{m}^3$，在常温($T=300\mathrm{K}$)下

$$\frac{N}{V}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T}\right)^{3/2}=\frac{3.54\times 10^7}{300^{3/2}}=3400\gg 1 \tag{22.3.1}$$

说明金属中的“自由”电子是强简并的 Fermi 气体. 由式(22.2.26)，处于能量 ε 的一个量子态的平均电子数或者占据概率为

$$\bar{f}=\frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon-\mu)]+1} \tag{22.3.2}$$

考虑到电子自旋，由式(21.2.33)，电子的能态密度为

$$g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon\equiv 2\times\frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon \tag{22.3.3}$$

故总电子数 N 为

$$N=\frac{4\pi V\,(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\beta(\varepsilon-\mu)]+1}\mathrm{d}\varepsilon \tag{22.3.4}$$

在给定电子数 N、温度 T 和电子数密度 $n=N/V$ 条件下，由上式可以求出化学势 $\mu(T,n)$. 系统的内能为

$$U=\frac{4\pi V(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{\varepsilon^3}}{\exp[\beta(\varepsilon-\mu)]+1}\mathrm{d}\varepsilon \tag{22.3.5}$$

1. **$T=0$ 情况**：由式(22.3.2)得

$$\bar{f}=\begin{cases}1, & \varepsilon<\mu(0,n)\\ 0, & \varepsilon>\mu(0,n)\end{cases} \tag{22.3.6}$$

可见，$T=0$ 时电子将尽量占据能量低的状态，但由于 Pauli 不相容原理，每一量子态至多只能容纳一个电子，因此电子从 $\varepsilon=0$ 的能态起依次填充到 $\mu(0,n)$. $\mu(0,n)$ 是 $T=0$ 时电子的最大能量，称为 **Fermi 能**，用 $\varepsilon_{\mathrm{F}}\equiv\mu(0,n)$ 表示. 由式(22.3.4)和(22.3.6)得

$$N=\frac{4\pi V\,(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{\mu(0,n)}\sqrt{\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon \tag{22.3.7}$$

故得到

$$\varepsilon_{\mathrm{F}}=\mu(0,n)=\frac{(2\pi\hbar)^2}{2m_{\mathrm{e}}}(3\pi^2 n)^{2/3} \tag{22.3.8}$$

定义 **Fermi 温度** $k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{F}}=\mu(0,n)$，$T_{\mathrm{F}}$ 的意义是：当系统的温度为 Fermi 温度时，电子热运动的能量与电子的 Fermi 能级相等. 仍以铜为例，$n\sim 8.5\times 10^{28}/\mathrm{m}^3$，$\mu(0,n)=7.0\mathrm{eV}$，故 $T_{\mathrm{F}}\sim 8\times 10^4\mathrm{K}$，远远高于通常的温度. $T=0$ 时系统的内能

$$U(0)=\frac{4\pi V\,(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{\mu(0,n)}\varepsilon^{3/2}\mathrm{d}\varepsilon=\frac{3}{5}N\mu(0,n) \tag{22.3.9}$$

2. **$T\neq 0$ 情况**：由式(22.3.2)得

$$\bar{f}\sim\begin{cases}>1/2, & \varepsilon<\mu\\ =1/2, & \varepsilon=\mu\\ <1/2, & \varepsilon>\mu\end{cases}\tag{22.3.10}$$

事实上，因为 $T_F\sim10^4$ K 远高于常温，在热运动能量 k_BT 的激发下，常温下只有在 Fermi 能附近 $\pm k_BT$ 的电子才能被激发而参与热运动，其他处于较低能级的电子基本不变化. 故占据概率只有在 $\mu\pm k_BT$ 附近稍许有点变化，即

$$\bar{f}=\begin{cases}1, & \varepsilon<\mu-k_BT\\ 1/2, & \varepsilon=\mu\\ 0, & \varepsilon>\mu+k_BT\end{cases}\tag{22.3.11}$$

我们来定量计算 $T\neq 0$ 时的化学势和内能表达式. 令函数 $\eta(\varepsilon)=\sqrt{\varepsilon}$ 或 $\eta(\varepsilon)=\sqrt{\varepsilon^3}$，由式(22.3.4)和(22.3.5)可知，关键是求积分

$$I\equiv\int_0^\infty\frac{\eta(\varepsilon)}{\exp[\beta(\varepsilon-\mu)]+1}\mathrm{d}\varepsilon\tag{22.3.12}$$

作变换 $\beta(\varepsilon-\mu)=x$，上式变为

$$\begin{aligned}I&=k_BT\int_{-\beta\mu}^\infty\frac{\eta(\mu+k_BTx)}{\exp(x)+1}\mathrm{d}x\\&=k_BT\int_0^{\beta\mu}\frac{\eta(\mu-k_BTx)}{\exp(-x)+1}\mathrm{d}x+k_BT\int_0^\infty\frac{\eta(\mu+k_BTx)}{\exp(x)+1}\mathrm{d}x\\&=k_BT\int_0^{\beta\mu}\frac{[\exp(x)+1-1]\eta(\mu-k_BTx)}{\exp(x)+1}\mathrm{d}x+k_BT\int_0^\infty\frac{\eta(\mu+k_BTx)}{\exp(x)+1}\mathrm{d}x\\&\approx\int_0^\mu\eta(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+k_BT\int_0^\infty\frac{\eta(\mu+k_BTx)-\eta(\mu-k_BTx)}{\exp(x)+1}\mathrm{d}x\end{aligned}\tag{22.3.13}$$

由于 $\mu/k_BT\gg1$，上式第二个积分中上限已取近似 $\beta\mu\to\infty$. 由式(22.3.11)，第二个积分中分母贡献主要在 $x=0$ 附近，故可把分子展开为 x 的函数并取 x 的一次项，即

$$\begin{aligned}I&=\int_0^\mu\eta(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+2(k_BT)^2\eta'(\mu)\int_0^\infty\frac{x}{\exp(x)+1}\mathrm{d}x+\cdots\\&=\int_0^\mu\eta(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\eta'(\mu)+\cdots\end{aligned}\tag{22.3.14}$$

于是，由式(22.3.4)和(22.3.5)得到电子数和内能的表达式

$$N=\frac{2}{3}C\mu^{3/2}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2\right]\tag{22.3.15}$$

$$U=\frac{2}{5}C\mu^{5/2}\left[1+\frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{k_BT}{\mu}\right)^2\right]\tag{22.3.16}$$

其中 $C=4\pi V(2m)^{3/2}/(2\pi\hbar)^3$. 由方程(22.3.15)

$$\mu = \left(\frac{3}{2}\frac{N}{C}\right)^{2/3}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^2\right]^{-2/3}$$
$$\approx \mu(0,n)\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu(0,n)}\right)^2\right] \qquad (22.3.17)$$

相应的内能为

$$U = \frac{2}{5}C\mu^{5/2}(0,n)\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu(0,n)}\right)^2\right]^{5/2}\left[1+\frac{5\pi^2}{8}\left(\frac{k_B T}{\mu(0,n)}\right)^2\right]$$
$$\approx \frac{3}{5}N\mu(0,n)\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\mu(0,n)}\right)^2\right] \qquad (22.3.18)$$

由此得到金属中电子气体的定容热容量为

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = Nk_B\frac{\pi^2}{2}\frac{k_B T}{\mu(0,n)} \equiv \gamma T \qquad (22.3.19)$$

由式(21.4.20)，离子阵振动对热容量的贡献正比于 T^3，而金属中电子的贡献正比于 T，故在极低温下主要是金属中电子的贡献.

22.4 电磁场的量子化、光子气体和 Bose-Einstein 凝聚

在第 13 章中，我们提到 Planck 在讨论黑体辐射时，假定黑体发射与吸收电磁波的能量方式是不连续的，只能取最小能量单位 ε 的整数倍，$\varepsilon=\hbar\omega$，因而成功解释了黑体辐射. 为什么电磁波的发射与吸收是量子化的呢？为什么电磁辐射场可看成服从 Bose-Einstein 统计的光子气体？我们首先讨论这个问题.

设在体积 $V=L^3$ 的空腔内存在电磁场. 在无源情况下，由 10.1 节可取 $\Phi=0$ 和$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$，则矢量势的方程为

$$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t^2} = 0 \qquad (22.4.1)$$

上式时间和空间分离变量 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})q(t)$得到

$$\nabla^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) + k^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = 0;\quad \ddot{q}(t)+\omega^2 q(t) = 0 \qquad (22.4.2)$$

的平面行波解为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}\frac{A_0}{\sqrt{\varepsilon_0}}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r});\quad q(t) = q_0\exp(\mathrm{i}\omega t) \qquad (22.4.3)$$

其中引进 $1/\sqrt{\varepsilon_0}$是为了方便，$\omega=kc$，$\boldsymbol{k}$ 为波矢量，$\boldsymbol{e}$ 为电磁波的极化方向. 由横波条件$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 得到 $\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{k}=0$，即波的偏振方向与传播方向垂直. 由周期性边界条件，频率 ω 和波矢量 $\boldsymbol{k}$ 取分立值

$$\boldsymbol{k}_\lambda = \frac{2\pi}{L}(\alpha\boldsymbol{e}_x+\beta\boldsymbol{e}_y+\gamma\boldsymbol{e}_z);\quad \omega_\lambda = \frac{2\pi c}{L}\sqrt{\alpha^2+\beta^2+\gamma^2} \qquad (22.4.4)$$

其中($\alpha,\beta,\gamma=0,\pm1,\pm2,\cdots$). 上式中已用 λ 表示三个量子数(α,β,γ)的集合. 不难

验证正交关系

$$\frac{1}{V}\int \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\lambda - \boldsymbol{k}_\sigma)\cdot \boldsymbol{r}]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \delta_{\lambda\sigma} \tag{22.4.5}$$

比较上式与式(22.4.3)第一个方程，取 $A_0 = 1/\sqrt{V}$，则 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 的正交关系为

$$\int \boldsymbol{A}_\lambda \cdot \boldsymbol{A}_{\lambda'}^* \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\varepsilon_0}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{22.4.6}$$

方程(22.4.1)的任意实解为平面波的叠加，即

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_\lambda [q_\lambda(t)\boldsymbol{A}_\lambda(\boldsymbol{r}) + q_\lambda^*(t)\boldsymbol{A}_\lambda^*(\boldsymbol{r})] \tag{22.4.7}$$

电磁场强度为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E} &= -\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\sum_\lambda [\dot{q}_\lambda(t)\boldsymbol{A}_\lambda(\boldsymbol{r}) + \dot{q}_\lambda^*(t)\boldsymbol{A}_\lambda^*(\boldsymbol{r})] \\ &= -\mathrm{i}\sum_\lambda \omega_\lambda [q_\lambda(t)\boldsymbol{A}_\lambda(\boldsymbol{r}) - q_\lambda^*(t)\boldsymbol{A}_\lambda^*(\boldsymbol{r})]\end{aligned} \tag{22.4.8}$$

$$\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_\lambda [q_\lambda(t)\nabla\times\boldsymbol{A}_\lambda(\boldsymbol{r}) + q_\lambda^*(t)\nabla\times\boldsymbol{A}_\lambda^*(\boldsymbol{r})] \tag{22.4.9}$$

由式(11.2.42)，电磁场的 Hamilton 函数为

$$H = \frac{1}{2}\int\left(\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2 + \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{22.4.10}$$

利用正交关系式(22.4.6)

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\int \varepsilon_0 \boldsymbol{E}^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} &= (-\mathrm{i})^2\frac{\varepsilon_0}{2}\sum_{\lambda,\lambda'}\omega_\lambda\omega_{\lambda'}\int[q_\lambda(t)\boldsymbol{A}_\lambda - q_\lambda^*(t)\boldsymbol{A}_\lambda^*] \\ &\quad\cdot[q_{\lambda'}(t)\boldsymbol{A}_{\lambda'} - q_{\lambda'}^*(t)\boldsymbol{A}_{\lambda'}^*]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{\lambda,\lambda'}\omega_\lambda\omega_{\lambda'}[q_\lambda(t)q_{\lambda'}^*(t)\delta_{\lambda\lambda'} + q_\lambda^*(t)q_{\lambda'}(t)\delta_{\lambda\lambda'}] \\ &= \frac{1}{2}\sum_\lambda \omega_\lambda^2[q_\lambda(t)q_\lambda^*(t) + q_\lambda^*(t)q_\lambda(t)]\end{aligned} \tag{22.4.11}$$

以及

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\mu_0}\int \boldsymbol{B}^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} &= \frac{1}{2\mu_0}\sum_{\lambda,\lambda'}\int[q_\lambda(t)\nabla\times\boldsymbol{A}_\lambda + q_\lambda^*(t)\nabla\times\boldsymbol{A}_\lambda^*] \\ &\quad\cdot[q_{\lambda'}(t)\nabla\times\boldsymbol{A}_{\lambda'} + q_{\lambda'}^*(t)\nabla\times\boldsymbol{A}_{\lambda'}^*]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &= \frac{1}{2\mu_0}\Big[\sum_{\lambda,\lambda'}q_\lambda(t)q_{\lambda'}^*(t)\int(\nabla\times\boldsymbol{A}_\lambda)\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A}_{\lambda'}^*)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ &\quad + q_\lambda^*(t)q_{\lambda'}(t)\int(\nabla\times\boldsymbol{A}_\lambda^*)\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A}_{\lambda'})\cdot\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\Big] \\ &= \frac{1}{2}\sum_\lambda\omega_\lambda^2[q_\lambda(t)q_\lambda^*(t) + q_\lambda^*(t)q_\lambda(t)]\end{aligned} \tag{22.4.12}$$

故电磁场的总能量为

$$H = \sum_\lambda \omega_\lambda^2 [q_\lambda(t) q_\lambda^*(t) + q_\lambda^*(t) q_\lambda(t)] \tag{22.4.13}$$

由于 q_λ 和 q_λ^* 非实变量，定义实变量

$$Q_\lambda = q_\lambda + q_\lambda^* ; \quad P_\lambda = \dot{q}_\lambda + \dot{q}_\lambda^* = \mathrm{i}\omega_\lambda (q_\lambda - q_\lambda^*) \tag{22.4.14}$$

(22.4.14)式的逆变换为

$$q_\lambda = \frac{1}{2}\left(Q_\lambda - \frac{\mathrm{i}}{\omega_\lambda} P_\lambda\right); \quad q_\lambda^* = \frac{1}{2}\left(Q_\lambda + \frac{\mathrm{i}}{\omega_\lambda} P_\lambda\right) \tag{22.4.15}$$

代入式(21.4.13)得到

$$H = \frac{1}{2}\sum_\lambda (P_\lambda^2 + \omega_\lambda^2 Q_\lambda^2) \tag{22.4.16}$$

因此 Q_λ 和 P_λ 可看作是彼此正则共轭的广义坐标和广义动量. 式(22.4.16)是一系列谐振子的 Hamilton 函数之和，由此辐射场可以看成多个谐振子组成的体系，振子频率为 $\omega_\lambda = k_\lambda c$. 相应地，电磁场的总动量为

$$\boldsymbol{P} = \frac{1}{\mu_0}\int (\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}) \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \tag{22.4.17}$$

把式(22.4.8)和(22.4.9)代入式(22.4.17)得到

$$\boldsymbol{P} = \sum_\lambda \frac{\boldsymbol{k}_\lambda}{\omega_\lambda} (P_\lambda^2 + \omega_\lambda^2 Q_\lambda^2) \tag{22.4.18}$$

对 Hamilton 函数和上式量子化后（本书不进一步讨论电磁场的量子化问题），可以得到能量本征值和动量本征值分别为

$$E = \sum_\lambda \left(n_\lambda + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_\lambda ; \quad \boldsymbol{P} = \sum_\lambda \left(n_\lambda + \frac{1}{2}\right)\hbar \boldsymbol{k}_\lambda \tag{22.4.19}$$

其中 n_λ 是具有角频率 ω_λ 的光子数. 因此，辐射场经过量子化后，就变成了由光子组成的体系. 光子的自旋为 1，故遵从 Bose-Einstein 统计. 每一个光子的能量和动量分别为

$$\varepsilon_\lambda = \hbar\omega_\lambda ; \quad \boldsymbol{p}_\lambda = \hbar \boldsymbol{k}_\lambda \tag{22.4.20}$$

由式(22.2.26)，热平衡时具有能量 $\varepsilon_\lambda = \hbar\omega_\lambda$ 的平均光子数为

$$n_\lambda = \frac{g_\lambda}{\exp(\beta\varepsilon_\lambda) - 1} \tag{22.4.21}$$

注意：光子系统粒子数不守恒，故 $\mu = 0$. 由式(21.2.32)，光子的态密度为

$$g_\lambda(\omega_\lambda)\mathrm{d}\omega_\lambda = 2 \times \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} p^2 \mathrm{d}p = \frac{V}{\pi^2 c^3}\omega_\lambda^2 \mathrm{d}\omega_\lambda \tag{22.4.22}$$

其中乘 2 是考虑到电磁波有两个偏振方向. 故辐射场的内能密度为

$$u(\omega_\lambda, T) = \frac{g_\lambda \varepsilon_\lambda}{\exp(\beta\varepsilon_\lambda) - 1} = \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega_\lambda^3 \mathrm{d}\omega_\lambda}{\exp(\beta\hbar\omega_\lambda) - 1} \tag{22.4.23}$$

上式即为 **Planck 黑体辐射公式**. 对给定的温度，低频情况下（$\beta\hbar\omega_\lambda \ll 1$），上式近似为

$$u(\omega_\lambda, T) \approx \frac{V\omega_\lambda^2}{\pi^2 c^3} k_B T \mathrm{d}\omega_\lambda = g_\lambda(\omega_\lambda) k_B T \mathrm{d}\omega_\lambda \tag{22.4.24}$$

称为 **Rayleigh-Jones 公式**，可由经典的能量均分定理得到；高频情况下($\beta\hbar\omega_\lambda \gg 1$)

$$u(\omega_\lambda, T) \approx \frac{V\hbar\omega_\lambda^3}{\pi^2 c^3} \exp(-\beta\hbar\omega_\lambda) \mathrm{d}\omega_\lambda \tag{22.4.25}$$

称为 **Wien 公式**. 辐射场总内能为

$$\begin{aligned} U(V,T) &= \sum_\lambda n_\lambda \varepsilon_\lambda = \sum_\lambda \frac{g_\lambda \varepsilon_\lambda}{\exp(\beta\varepsilon_\lambda) - 1} \\ &= \frac{V}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\hbar\omega_\lambda^3 \mathrm{d}\omega_\lambda}{\exp(\beta\hbar\omega_\lambda) - 1} = \frac{\pi^2 k_B^4}{15(\hbar c)^3} V T^4 \end{aligned} \tag{22.4.26}$$

上式与实验结果符合. 但是如果把经典的能量均分公式(22.4.24)推广到高频，则 $U(V,T) \to \infty$，称为**紫外灾难**. 上式也可由巨配分函数得到. 由式(22.2.2)，巨配分函数 Ξ 的对数为

$$\begin{aligned} \ln\Xi &= -\sum_\lambda g_\lambda \ln[1 - \exp(-\beta\varepsilon_\lambda)] \\ &= -\frac{V}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega_\lambda^2 \ln[1 - \exp(-\beta\hbar\omega_\lambda)] \mathrm{d}\omega_\lambda = \frac{\pi^2 V}{45 c^3} \frac{1}{(\beta\hbar)^3} \end{aligned} \tag{22.4.27}$$

故光子气体的内能为

$$U(V,T) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln\Xi = \frac{\pi^2 k_B^4}{15(\hbar c)^3} V T^4 \tag{22.4.28}$$

压强和熵分别为

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial V} \ln\Xi = \frac{\pi^2 k_B^4}{45(\hbar c)^3} T^4 \tag{22.4.29}$$

和

$$S = k_B \left(\ln\Xi - \beta \frac{\partial}{\partial\beta} \ln\Xi \right) = \frac{4\pi^2 k_B^4}{45\,(\hbar c)^3} V^2 T^3 \tag{22.4.30}$$

比较式(22.4.28)和(22.4.29)，显然有关系

$$p = \frac{1}{3} \frac{U}{V} \tag{22.4.31}$$

Bose-Einstein 凝聚：最后我们讨论遵从 Bose-Einstein 统计系统的一个奇特性质，即 Bose-Einstein 凝聚现象. 由于 Bose 子没有 Pauli 原理的限制，当温度降低时，粒子将向低能量状态转移. 如果 $T=0$，所有的 Bose 子将占据最低的能量状态.

我们从化学势随温度的变化来讨论 Bose-Einstein 凝聚问题. 对光子系统，因光子数不守恒，故 $\mu=0$. 对一般的 Bose 气体系统 $\mu \neq 0$. 由于任何能级上的平均粒子数一定大于零，故由式(22.4.21)，$\exp[\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)] - 1 > 0$，或者 $\mu < \varepsilon_\lambda$. 如果最低能级 $\varepsilon_0 = 0$，那么 $\mu < 0$. 故对 Bose 子系统，化学势一定是负的. 决定化学势的方程为

$$N=\sum_{\lambda}\frac{g_{\lambda}}{\exp[\beta(\varepsilon_{\lambda}-\mu)]-1} \tag{22.4.32}$$

注意：g_λ 和 ε_λ 是单粒子能级和简并度，与温度无关. 当 N 一定时，由上式决定的 μ 与温度的关系为：T 降低，μ 上升，但化学势必须小于零. 因此随着温度下降，$\mu\to 0^-$. $\mu\to 0^-$ 的温度称为**临界温度 T_c**，显然由下式决定

$$N=\sum_{\lambda}\frac{g_{\lambda}}{\exp(\varepsilon/k_B T_c)-1} \tag{22.4.33}$$

由式(21.2.33)，当 $\Delta\varepsilon\ll k_B T$，上式简化为

$$N=\frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{3/2}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{\varepsilon}}{\exp(\varepsilon/k_B T_c)-1}d\varepsilon \tag{22.4.34}$$

令 $x=\varepsilon/k_B T$，上式为

$$\begin{aligned}N&=\frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2mk_B T_c)^{3/2}\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{x}}{\exp(x)-1}dx\\&=\frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2mk_B T_c)^{3/2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\cdot 2.612\end{aligned} \tag{22.4.35}$$

故临界温度 T_c 为

$$T_c=\frac{2\pi}{(2.612)^{2/3}}\frac{\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{22.4.36}$$

当 $T<T_c$ 时会出现什么现象呢？分析方程(22.4.21)可知：当 $T<T_c$ 时，因为化学势 $\mu=0^-$，$\varepsilon_0=0$ 的一项分母为零，需要单独考虑. 令

$$N=N_0(T)+\sum_{\lambda\neq 0}\frac{g_{\lambda}}{\exp[\beta(\varepsilon_{\lambda}-\mu)]-1} \tag{22.4.37}$$

其中 $N_0(T)$ 为处在能级 $\varepsilon_0=0$ 上的粒子数. 由式(21.2.33)，上式为

$$N=N_0(T)+\frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{3/2}\int_{0+}^{\infty}\frac{\sqrt{\varepsilon}}{\exp(\varepsilon/k_B T)-1}d\varepsilon \tag{22.4.38}$$

积分后得到

$$N=N_0(T)+N\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \tag{22.4.39}$$

即

$$N_0(T)=N\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right] \tag{22.4.40}$$

可见在 $T<T_c$ 时，就有宏观量级的粒子在最低能级 $\varepsilon_0=0$ 凝集，这一现象称为 **Bose-Einstein 凝聚**，T_c 称为**凝聚温度**.

在最低能级 $\varepsilon_0=0$ 凝集的粒子对内能、熵、压强的贡献为零，故在 $T<T_c$ 时，Bose 系统的内能为

$$U=\frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3}(2m)^{3/2}\int_{0^+}^{\infty}\frac{\sqrt{\varepsilon^3}}{\exp(\varepsilon/k_B T)-1}d\varepsilon$$

$$= 0.770Nk_{\mathrm{B}}T\left(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}\right)^{3/2} \tag{22.4.41}$$

定容热容量为

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 1.925Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}\right)^{3/2} \tag{22.4.42}$$

式(22.4.36)可以改写成

$$\left(\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\pi mk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}}\right)^3\left(\frac{N}{V}\right) = 2.612 \tag{22.4.43}$$

发生 Bose-Einstein 凝聚时，原子热运动的能量为 $k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}$，动量为 $p=\sqrt{2mk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}$，相应的 de Broglie 波长即为 $2\pi\hbar/\sqrt{2\pi mk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}$. 故满足上式时，de Broglie 波长与原子的平均间距在同一个数量级，量子统计关联起着决定性作用. 方程(22.4.43)是准独立 Bose 子系统的凝聚条件，对一般具有弱相互作用的 Bose 子系统，凝聚条件为

$$\left(\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\pi mk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}}\right)^3\left(\frac{N}{V}\right) \geqslant 2.612 \tag{22.4.44}$$

Bose-Einstein 凝聚是目前比较热门的研究课题.

习　题　22

22.1　证明理想 Bose 和 Fermi 系统的熵可分别表示为

$$S^{\mathrm{B}} = -k_{\mathrm{B}}\sum_s[f_s\ln f_s - (1+f_s)\ln(1+f_s)]$$

$$S^{\mathrm{F}} = -k_{\mathrm{B}}\sum_s[f_s\ln f_s + (1-f_s)\ln(1-f_s)]$$

其中 f_s 为量子态 s 上的平均粒子数，并证明当 $f_s \ll 1$ 时

$$S^{\mathrm{B}} \approx S^{\mathrm{F}} \approx S^{\mathrm{M}} \approx -k_{\mathrm{B}}\sum_s[f_s\ln f_s - f_s]$$

(提示：由熵的表达式 $S=k_{\mathrm{B}}\ln\Omega$，直接用公式(22.1.6). 注意：$f_s=n_s/g_s$)

22.2　证明广势函数 $\Omega=U-TS-\mu N$(其中 μ 为单个粒子的化学势)与巨配分函数的关系

$$\Omega = -k_{\mathrm{B}}T\ln\Xi$$

从而证明巨配分函数与压强的关系

$$pV = k_{\mathrm{B}}T\ln\Xi$$

(提示：利用式(22.2.7)和关系 $\alpha=-\beta\mu$. 注意：对单个粒子的化学势 μ

$$G = U + pV - TS = \mu N)$$

22.3　室温下某金属中自由电子气体的数密度为 $n=6\times10^{28}/\mathrm{m}^3$；而某半导体中导电电子的数密度为 $n=6\times10^{20}/\mathrm{m}^3$. 验证这两种电子气体的简并性质.（提

示：直接利用公式 $T^* = \left(\frac{N}{JV}\right)^{2/3}\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}$)

22.4 由热力学公式

$$S = \int \frac{C_V}{T}\mathrm{d}T$$

求低温下金属中自由电子气体的熵.

答案：$S = Nk_B \frac{\pi^2}{2}\frac{k_B T}{\mu(0)}$.

22.5 某星体可看作由极端相对论性的强简并 Fermi 气体组成，求星体质量与平衡半径的关系.（提示：对极端相对论气体，态密度为

$$g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \frac{8\pi V p^2 \mathrm{d}p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{8\pi V \varepsilon^2}{(2\pi\hbar)^3 c^3}\mathrm{d}\varepsilon$$

在 $T=0$K，粒子数为

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$$

可得到 Fermi 能的表达式为

$$\varepsilon_F = 2\pi\hbar c\left(\frac{3N}{8\pi V}\right)^{1/3}$$

另一方面，内能为

$$U = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon g(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon = \frac{3}{4}N\varepsilon_F$$

故压强为 $p=U/(3V)$，平衡方程

$$-p4\pi R^2\mathrm{d}R + \frac{GM^2}{R^2}\mathrm{d}R = 0$$

其中 M 为星体质量，G 为万有引力常量，于是可得星体质量与平衡半径的关系）

22.6 证明二维和一维理想 Bose 系统不可能发生 Bose-Einstein 凝聚.（提示：发生 Bose 凝聚的条件为 $\mu=0$，对面积为 A 的二维理想 Bose 系统

$$\begin{aligned}
N &= \frac{2\pi m A}{(2\pi\hbar)^2}k_B T\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon-\mu)]-1} \\
&= \frac{2\pi m A}{(2\pi\hbar)^2}\int_0^\infty \sum_{l=1}^\infty \exp[-l\beta(\varepsilon-\mu)]\mathrm{d}\varepsilon \\
&= \frac{2\pi m A}{(2\pi\hbar)^2}k_B T\sum_{l=1}^\infty \frac{1}{l}\exp(l\beta\mu)
\end{aligned}$$

对长为 L 的一维系统

$$N = \frac{\sqrt{2m}L}{2(2\pi\hbar)}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon}\exp[\beta(\varepsilon-\mu)]-1}$$

如果取 $\mu=0$，都将发散）

22.7　一维点阵由 $N(N\gg 1)$个粒子组成，相邻粒子之间有弹性相互作用，简振频率为

$$\omega_n=\omega\sqrt{2\left(1-\cos\frac{2\pi n}{N}\right)},\quad -\frac{N}{2}<n<\frac{N}{2}$$

其中 ω 为常量，系统处于温度为 T 的平衡态. (1) 求定容(即定长)热容量 C_V；(2) 求$T\to 0$ 时，C_V 的表达式. (提示：一维点阵的内能为

$$U=\sum_{n=-N/2}^{N/2}\frac{\hbar\omega_n}{\exp(\beta\hbar\omega_n)-1}$$

当 $k_{\mathrm{B}}T\gg\hbar\omega_n$ 时

$$U=\sum_{n=-N/2}^{N/2}\hbar\omega_n\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\omega_n}=Nk_{\mathrm{B}}T$$

当 $k_{\mathrm{B}}T\ll\hbar\omega_n$ 时

$$U=\sum_{n=-N/2}^{N/2}\hbar\omega_n\frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega_n)-1}\approx 2\sum_{n=0}^{N/2}\hbar\omega_n\exp(-\beta\hbar\omega_n)$$

热容量为

$$C_V=\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}T}=2\sum_{0}^{N/2}\frac{(\hbar\omega_n)^2}{k_{\mathrm{B}}T^2}\exp\left(-\frac{\hbar\omega_n}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$$

利用$(N\gg 1)$条件，求和化成积分：$C_V\sim T/\omega$)

22.8　石墨具有层状晶体结构，其层间原子的耦合远小于层内原子的耦合，实验发现在低温下石墨的定容热容量与温度的关系不是 T^3，而是 T^2. 用 Debye 理论说明. (提示：由于层间耦合小，考虑二维振动，态密度为

$$g(\omega)\mathrm{d}\omega=\frac{L^2}{2\pi}\left(\frac{1}{c_{\mathrm{l}}^2}+\frac{1}{c_{\mathrm{t}}^2}\right)\omega\mathrm{d}\omega,\quad \omega\leqslant\omega_{\mathrm{D}}$$

求内能，然后证明 $C_V\sim T^2$)

第 23 章　系 综 理 论

前两章的统计方法只适用于准独立粒子系统. 对准独立粒子,单粒子能级和单粒子能级上的占据数有确定的意义. 但如果粒子-粒子间的相互作用不能忽略时,根据第 17 章讨论,尽管仍然能定义单粒子能级和单粒子态,但此时的单粒子态已不能由它自身的坐标和动量来确定,还与其他粒子的坐标和动量有关,也就是说,任何一个粒子的状态发生变化都会影响其余粒子的运动状态,单粒子状态已不能从这个系统的状态中分离出来. 相应地,用单粒子态上的分布来代表系统的状态也是不适合的. 必须直接从整个系统的状态出发,分析系统的微观状态与宏观热力学量之间的统计关系. 从经典的描述来讲,必须用整个系统的广义坐标和广义动量所形成的相空间来描述系统的状态. 本章介绍由相互作用粒子组成的系统的平衡态统计物理,即系综理论.

23.1　统计系综、各态经历假定和微正则分布

在描述系统的微观状态时,根据第 14 章的讨论,可以用一组完全集合的力学量$(E,L,M,\cdots)$的量子数$(l,m,n,\cdots)$来表示(为了方便用单一指标 λ 表示). 如果用经典的方法描述,用相空间中一个相点$(p_i,q_i)(i=1,2,\cdots,r)$(为了方便用$(p,q)$表示)(严格地说,应该是体积为$(2\pi\hbar)^r$ 的一个相格,其中 r 是系统的自由度)来描述系统的运动状态.

在一定的宏观条件下(如总能量一定、总体积一定等),当系统达到统计平衡时,在宏观上系统处于一个确定的平衡态,即具有确定的内能、温度、熵和体积等. 但从微观角度来看,它的微观状态远没有固定下来. 因为一个宏观系统的自由度数目巨大,它的微观状态决定于全部自由度的值. 可是一个宏观的平衡态只用内能、温度、熵、体积等几个参量就能确定. 所以,在给定的宏观条件下虽然对应一个确定的宏观态,但是系统的量子数 λ 或相点(p,q)的值还可以有许许多多的可能. 把这个巨大数目的微观状态的集合称为**统计系综**.

用指标 λ 标志统计系综中每个微观状态,ρ_λ 表示第 λ 个微观状态出现的概率,又以 B_λ 表示微观量 B 在量子态 λ 上的数值,微观量 B 在一切可能的微观状态上的平均

$$\bar{B} = \sum_\lambda \rho_\lambda B_\lambda \tag{23.1.1}$$

就是与微观量 B 相应的宏观物理量. 因此，**系综理论的根本任务就是求概率分布，或者称为系综分布函数 ρ_λ.**

现在讨论处于平衡状态的孤立系统的系综分布函数 ρ_λ. 设孤立系统的能量为 E，那么系统的一切微观状态变化(指系统从一个微观状态跃迁到另一个微观状态)必须保持能量 E 一定. 既然除能量外，我们没有对这种跃迁设定任何限制，属于同一能量的各个微观状态的地位是相同的. 因此可以认为：对一个能量为 E 的孤立系统，当达到统计平衡时，属于同一能量 E 的所有微观状态出现的概率相等. 这个结论称为**等概率原理**. 它是平衡态统计物理的一个基本假设，其正确性由由此得到的推论与实际相符而肯定. 从等概率原理得到

$$\rho_\lambda = \begin{cases} C, & \text{能量等于 } E \text{ 的所有微观状态} \\ 0, & \text{能量不等于 } E \text{ 的所有微观状态} \end{cases} \tag{23.1.2}$$

设孤立系统在能量为 E 时，总的微观状态数为 Ω，则由归一化条件

$$\sum_{\lambda=1}^{\Omega} \rho_\lambda = 1 \tag{23.1.3}$$

于是平衡状态孤立系统的系综分布函数 ρ_λ 为

$$\rho_\lambda = \frac{1}{\Omega} \tag{23.1.4}$$

称为**微正则分布**. 满足孤立系统条件的统计系综称为**微正则系综**.

必须补充说明三点：

1. 绝对孤立的系统是不存在的，当系统与外界媒质的相互作用可以忽略时，可看成孤立系统. 由于系统与外界媒质存在微弱的相互作用，系统的能量有一定的变化范围，即 $E+\Delta E$；

2. 一个绝对孤立的系统，不管初态是处于什么态，它的各个力学量(如动量、动量矩等)都不再变化，处于一个确定的微观态. 因此也没有什么等概率原理了. 正是由于系统与外界媒质的微弱相互作用，使系统从一个微观状态跃迁到另一个微观状态，每个微观态出现的概率相等(当然要保持能量一定)；

3. 微正则分布式(23.1.4)的推论是，属于同一能量的全部微观态是可以经历的，即**各态经历假定**. 一个绝对孤立的系统是不可能各态经历的.

设系统含有 N 个全同粒子. 在经典极限下，由第6章的讨论，如果系统受保守力场作用，则 Hamilton 函数 $H(q,p)$ 为守恒量. 在相空间中，$H(q,p)=E$ 表示一个超曲面，故能量在 $E \to E+\Delta E$ 范围内的微观状态数为

$$\Omega = \frac{1}{N!}\int \frac{\mathrm{d}\mu}{(2\pi\hbar)^r} = \frac{1}{N!}\int \frac{\mathrm{d}q_1 \mathrm{d}q_2 \cdots \mathrm{d}q_r \mathrm{d}p_1 \mathrm{d}p_2 \cdots \mathrm{d}p_r}{(2\pi\hbar)^r} \tag{23.1.5}$$

上式积分在相空间能壳 $E \leqslant H(q,p) \leqslant E+\Delta E$ 中进行，$N!$ 是由于粒子的全同性而引进的，任意两个粒子交换都不产生新的状态，共有 $N!$ 种交换方式.

从微正则分布式(23.1.4)，可导出系统热力学平衡的关系. 考虑孤立系统 A^0，它由微弱相互作用的两个子系统 A_1 和 A_2 组成. 以 $\Omega_1(N_1, E_1, V_1)$ 和 $\Omega_2(N_2, E_2, V_2)$ 分别表示 A_1 和 A_2 的微观状态数，其中 $N_{1,2}$、$E_{1,2}$ 和 $V_{1,2}$ 分别表示 A_1 和 A_2 的粒子数、能量和体积. 复合系统 A^0 的微观状态数为

$$\Omega^{(0)}(E_1, E_2) = \Omega_1(N_1, E_1, V_1)\Omega_2(N_2, E_2, V_2) \tag{23.1.6}$$

令 A_1 和 A_2 进行热接触，它们只有能量的交换，不交换粒子数且体积不变. 由于 A^0 是孤立系统，总能量不变

$$E_1 + E_2 = E^{(0)} \tag{23.1.7}$$

代入式(23.1.6)得到

$$\Omega^{(0)}(E_1, E^{(0)} - E_1) = \Omega_1(N_1, E_1, V_1)\Omega_2(N_2, E^{(0)} - E_1, V_2) \tag{23.1.8}$$

因此 $\Omega^{(0)}(E_1, E^{(0)} - E_1)$ 是 E_1 的函数. 根据等概率原理，在平衡态下孤立系统一切可能的微观态出现的概率相等. 如果存在 $E_1 = \bar{E}_1$，使 $\Omega^{(0)}(E_1, E^{(0)} - \bar{E}_1)$ 达到极大且比其他 E_1 的微观状态数总和还大得多，则可以认为 $E_1 = \bar{E}_1$ 是一种最可几的分布，$\bar{E}_1$ 和 $\bar{E}_2 = E^{(0)} - \bar{E}_1$ 就是子系统 A_1 和 A_2 达到热平衡时分别具有的内能. 由极大条件

$$\frac{\partial \Omega^{(0)}}{\partial E_1} = 0 \tag{23.1.9}$$

将式(23.1.8)代入上式得到

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Omega^{(0)}}{\partial E_1} &= \frac{\partial \Omega_1}{\partial E_1}\Omega_2 + \frac{\partial \Omega_2}{\partial E_1}\Omega_1 = \frac{\partial \Omega_1}{\partial E_1}\Omega_2 + \frac{\partial \Omega_2}{\partial E_2}\frac{\partial E_2}{\partial E_1}\Omega_1 \\ &= \frac{\partial \Omega_1}{\partial E_1}\Omega_2 - \frac{\partial \Omega_2}{\partial E_2}\Omega_1 = 0\end{aligned} \tag{23.1.10}$$

即

$$\left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial E_1}\right)_{N_1, V_1} = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2}\right)_{N_2, V_2} \tag{23.1.11}$$

令

$$\beta_1 = \left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial E_1}\right)_{N_1, V_1}; \quad \beta_2 = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2}\right)_{N_2, V_2} \tag{23.1.12}$$

那么子系统 A_1 和 A_2 热平衡的条件为

$$\beta_1 = \beta_2 \tag{23.1.13}$$

而由式(20.1.9)和(20.1.11)的第一式，热平衡条件为

$$\frac{1}{T_1} = \left(\frac{\partial S_1}{\partial U_1}\right)_{N_1, V_1} = \frac{1}{T_2} = \left(\frac{\partial S_2}{\partial U_2}\right)_{N_2, V_2} \tag{23.1.14}$$

故 $\beta = 1/k_B T$. 注意到热平衡时 $\bar{E}_1 = U_1$ 和 $\bar{E}_2 = U_2$，比较上式和方程(23.1.11)，得到平衡态熵与微观状态数的关系

$$S = k_B \ln \Omega \tag{23.1.15}$$

这是我们熟悉的 **Boltzmann 关系**. 但前两章中讨论的是准独立系统,现在可以包括粒子之间存在相互作用的情况.

如果子系统 A_1 和 A_2 之间不仅可以交换能量而且可以改变体积和交换粒子,根据类似的讨论,可得到平衡条件为

$$\left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial E_1}\right)_{N_1, V_1} = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial E_2}\right)_{N_2, V_2} \tag{23.1.16}$$

$$\left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial V_1}\right)_{N_1, E_1} = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial V_2}\right)_{N_2, E_2} \tag{23.1.17}$$

$$\left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial N_1}\right)_{V_1, E_1} = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial N_2}\right)_{V_2, E_2} \tag{23.1.18}$$

令

$$\gamma_1 = \left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial V_1}\right)_{N_1, E_1}; \quad \gamma_2 = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial V_2}\right)_{N_2, E_2} \tag{23.1.19}$$

$$\alpha_1 = \left(\frac{\partial \ln \Omega_1}{\partial N_1}\right)_{V_1, E_1}; \quad \alpha_2 = \left(\frac{\partial \ln \Omega_2}{\partial N_2}\right)_{V_2, E_2} \tag{23.1.20}$$

子系统 A_1 和 A_2 的平衡条件可写成

$$\beta_1 = \beta_2; \quad \gamma_1 = \gamma_2; \quad \alpha_1 = \alpha_2 \tag{23.1.21}$$

为了确定 $\gamma_{1,2}$ 和 $\alpha_{1,2}$ 的意义,求全微分

$$\mathrm{d}\ln \Omega = \beta \mathrm{d}E + \gamma \mathrm{d}V + \alpha \mathrm{d}N \tag{23.1.22}$$

与热力学关系 $T\mathrm{d}S = \mathrm{d}U + p\mathrm{d}V - \mu \mathrm{d}N$ 比较,并且考虑到式(23.1.15),可知

$$\beta = \frac{1}{k_B T}; \quad \gamma = \frac{p}{k_B T}; \quad \alpha = -\frac{\mu}{k_B T} \tag{23.1.23}$$

因此子系统 A_1 和 A_2 的平衡条件式(23.1.21)与式(20.1.11)相当.

利用微正则分布求热力学关系比较复杂,下面介绍其他系综分布以及推导热力学关系的方法.

23.2 正则分布、能量涨落和热力学关系

一个孤立系统具有确定的能量 E、粒子数 N 和体积 V. 但在实际问题中,需要研究与外界媒质有交换(能量交换、粒子数交换或者体积可变)的系统. 对这种系统,不同的条件可以得到不同的系综分布函数. 本节介绍具有确定的 N、V 和 T(即定温、定容和定粒子数)系统的分布.

正则分布: 具有确定 N、V 和 T 的系统可设想为与一个大热源接触而达到平衡态的系统. 系统与大热源可以交换能量,因此系统可能的微观状态可具有不同的

能量(注意:与孤立系统不同!). 由这种系统的微观状态集合组成的统计系综称为**正则系综**. 由于热源很大,交换能量不会改变热源的温度,在二者建立平衡后,系统与热源有同样的温度. 把系统与热源合起来构成一个复合系统. 显然复合系统可看成一个孤立系统,于是可应用等概率原理求得系统具有不同能量的概率分布函数. 为了方便,用下标 1、2 分别表示系统和热源. 复合系统是孤立系统,总能量 E_0 守恒

$$E_1 + E_2 = E_0 \tag{23.2.1}$$

复合系统的微观状态数为系统和热源的微观状态数之积,即

$$\Omega(E_0) = \Omega_1(E_1)\Omega_2(E_2) = \Omega_1(E_1)\Omega_2(E_0 - E_1) \tag{23.2.2}$$

上式表示:复合系统的微观状态数是系统能量 E_1 的函数,可以写成 $\Omega(E_1)$. 由于复合系统微观状态的出现是等概率的,$\Omega(E_1)$越大,系统具有能量 E_1 的概率就越大. 因此系统具有能量 E_1 的概率正比于 $\Omega(E_1)$,即

$$\rho_{E_1} \sim \Omega(E_1) = \exp\left[\frac{S(E_1)}{k_B}\right] \tag{23.2.3}$$

其中 $S(E_1)$是复合系统的熵,得到上式已利用了式(23.1.15). 利用熵的广延量特性,复合系统的熵等于系统的熵与热源的熵之和

$$S(E_1) = S_1(E_1) + S_2(E_2) = S_1(E_1) + S_2(E_0 - E_1) \tag{23.2.4}$$

得到上式与式(23.2.1),已忽略了系统与热源接触的表面效应,只有在热力学极限下才成立,对宏观系统,这个假定是没有问题的. 由于 $E_1 \ll E_0$,上式根据 E_1 展开得到

$$S(E_1) \approx S_1(E_1) + S_2(E_0) - \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{E_1=0} E_1 + \cdots \tag{23.2.5}$$

由热力学关系 $\partial S_2/\partial E_2 = 1/T_2$ 且热源与系统温度相等,代入上式

$$S(E_1) \approx S_1(E_1) + S_2(E_0) - \frac{E_1}{T_1} \tag{23.2.6}$$

由方程(23.2.3)得到

$$\rho_{E_1} \sim \exp\left[\frac{S_1(E_1)}{k_B}\right]\exp\left(-\frac{E_1}{k_B T_1}\right) \tag{23.2.7}$$

推导(23.2.7)式时,已把常数 $S_2(E_0)$忽略了. 再利用式(23.1.15)可以得到

$$\rho_{E_1} = C\Omega_1(E_1)\exp\left(-\frac{E_1}{k_B T_1}\right) \tag{23.2.8}$$

其中比例常数 C 由归一化条件决定

$$\sum_{E_1}\rho_{E_1} = C\sum_{E_1}\Omega_1(E_1)\exp\left(-\frac{E_1}{k_B T_1}\right) = 1 \tag{23.2.9}$$

令配分函数

$$Z = \sum_{E_1}\Omega_1(E_1)\exp\left(-\frac{E_1}{k_B T_1}\right) \tag{23.2.10}$$

注意:上式与式(21.2.9)的区别,这里 E_1 是整个系统的能量.最后得到正则系综的分布函数为

$$\rho_{E_1}=\frac{\Omega_1(E_1)}{Z}\exp\left(-\frac{E_1}{k_BT_1}\right) \tag{23.2.11}$$

去除下标1且设系统的能量是量子化的,即 E_λ,则上式可改写成

$$\rho_{E_\lambda}=\frac{\Omega(E_\lambda)}{Z}\exp(-\beta E_\lambda) \tag{23.2.12}$$

它表示:当系统与周围的媒质处于热平衡时,系统处于能级 E_λ 的概率分布(再说明一下,这里的能级是整个系统的能级).从上式可见,ρ_{E_λ} 由两项决定:指数衰减项,随 E_λ 增加很快趋向于零;状态数 $\Omega(E_\lambda)$(即能级 E_λ 的简并度),随 E_λ 增加将迅速增大.两者综合平衡后在 $\bar{E}$ 处出现极大,其中 $\bar{E}$ 为系统的平均能量,即内能

$$\begin{aligned}U=\bar{E}&=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}E_\lambda=\frac{1}{Z}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda)E_\lambda\exp(-\beta E_\lambda)\\&=-\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda)\exp(-\beta E_\lambda)=-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}=-\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta}\end{aligned} \tag{23.2.13}$$

能量涨落:下面来分析一下能量偏差 $(E_\lambda-\bar{E})^2$ 的系综平均 $\overline{(E_\lambda-\bar{E})^2}$,即能量涨落

$$\begin{aligned}\overline{(E_\lambda-\bar{E})^2}&=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}(E_\lambda-\bar{E})^2=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}(E_\lambda^2-2E_\lambda\bar{E}+\bar{E}^2)\\&=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}E_\lambda^2-2\bar{E}\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}E_\lambda+\bar{E}^2)\\&=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}E_\lambda^2-2\bar{E}\bar{E}+\bar{E}^2=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}E_\lambda^2-\bar{E}^2\end{aligned} \tag{23.2.14}$$

而

$$\begin{aligned}\sum_\lambda\rho_{E_\lambda}E_\lambda^2&=\frac{1}{Z}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda)E_\lambda^2\exp(-\beta E_\lambda)\\&=-\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda)E_\lambda\exp(-\beta E_\lambda)=-\frac{1}{Z}\frac{\partial(ZU)}{\partial\beta}\\&=-\frac{U}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}-\frac{\partial U}{\partial\beta}=-U\frac{\partial\ln Z}{\partial\beta}-\frac{\partial U}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial\beta}=\bar{E}^2+k_BT^2C_V\end{aligned}$$

代入式(23.2.14)得到

$$\overline{(E_\lambda-\bar{E})^2}=k_BT^2C_V \tag{23.2.15}$$

能量的相对涨落为

$$\sqrt{\frac{\overline{(E_\lambda-\bar{E})^2}}{\bar{E}^2}}=\sqrt{\frac{k_BT^2C_V}{\bar{E}^2}}\sim\frac{1}{\sqrt{N}} \tag{23.2.16}$$

得到上式最后一步是因为 C_V 和 $\bar{E}$ 都是广延量,正比于 N.因此相对涨落为 10^{-10}

数量级，是非常小的. 上式说明：正则分布在平均能量 $\bar{E}$ 附近出现的极大是非常陡的，其他能量状态出现的概率基本为零.

方程(23.2.12)是系统在能级 E_λ 上的概率，而能级 E_λ 的简并度为 $\Omega(E_\lambda)$，故处于能级 E_λ 的每个量子态的概率为

$$\rho_\lambda = \frac{1}{Z}\exp(-\beta E_\lambda) \tag{23.2.17}$$

而配分函数改成对每个量子态的求和

$$Z = \sum_\lambda \exp(-\beta E_\lambda) \tag{23.2.18}$$

热力学关系：系统的其他宏观参数和热力学函数可通过分布式(23.2.17)求得.

1. 广义力 Y：是 $\partial E_\lambda/\partial y$ 的系综平均

$$\begin{aligned} Y &= \frac{1}{Z}\sum_\lambda \frac{\partial E_\lambda}{\partial y}\exp(-\beta E_\lambda) \\ &= \frac{1}{Z}\left(-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial y}\right)\sum_\lambda \exp(-\beta E_\lambda) = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial y} \end{aligned} \tag{23.2.19}$$

对简单的 p-V 系统

$$p = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial V} \tag{23.2.20}$$

2. 熵函数：由 $T\mathrm{d}S = \mathrm{d}U - Y\mathrm{d}y$ 得到

$$\mathrm{d}S = \frac{\mathrm{d}U}{T} - \frac{Y\mathrm{d}y}{T} = k_\mathrm{B}\left[-\beta\mathrm{d}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right) + \frac{\partial \ln Z}{\partial y}\mathrm{d}y\right] \tag{23.2.21}$$

而

$$\mathrm{d}(\ln Z) = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\mathrm{d}\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial y}\mathrm{d}y \tag{23.2.22}$$

代入式(23.2.21)得到

$$\begin{aligned} \mathrm{d}S &= k_\mathrm{B}\left[-\beta\mathrm{d}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right) + \mathrm{d}(\ln Z) - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\mathrm{d}\beta\right] \\ &= k_\mathrm{B}\left[-\mathrm{d}\left(\beta\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right) + \mathrm{d}(\ln Z)\right] = k_\mathrm{B}\mathrm{d}\left[\ln Z - \beta\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right] \end{aligned} \tag{23.2.23}$$

因此熵函数为

$$S = k_\mathrm{B}\left[\ln Z - \beta\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right] \tag{23.2.24}$$

3. 自由能函数：由 $F = U - TS$ 得到

$$F = -k_\mathrm{B}T\ln Z;\quad Z = \exp\left(-\frac{F}{k_\mathrm{B}T}\right) \tag{23.2.25}$$

利用上式,分布式(23.2.17)可以写成简洁的形式

$$\rho_\lambda = \exp[\beta(F - E_\lambda)] \tag{23.2.26}$$

最后给出经典极限下,配分函数的表达式

$$Z = \frac{1}{N!}\frac{1}{(2\pi\hbar)^r}\int \exp[-\beta E(p,q)]\mathrm{d}p\mathrm{d}q \tag{23.2.27}$$

注意:(p,q)是$(p_1,p_2,\cdots p_r;q_1,q_2,\cdots,q_r)$的简写. 只要求出 Z,就可以由以上热力学函数求宏观热力学量.

例 23.2.1 单原子理想气体的配分函数.

解: 设有 N 个分子,则有 $3N$ 个自由度,系统的能量为

$$E(p,q) = \sum_{i=1}^{3N}\frac{p_i^2}{2m} \tag{23.2.28}$$

由式(23.2.27)

$$Z = \frac{1}{N!}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\int \exp[-\beta E(p,q)]\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\cdots\mathrm{d}p_{3N}\mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2\cdots\mathrm{d}q_{3N}$$

因能量与坐标无关,对 $3N$ 个坐标的积分出现体积 V^N,故

$$Z = \frac{1}{N!}\frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}}\int \exp[-\beta E(p,q)]\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\cdots\mathrm{d}p_{3N} \tag{23.2.29}$$

而对动量的积分中,每个动量的积分为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\beta\frac{p^2}{2m}\right)\mathrm{d}p = \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{1/2} \tag{23.2.30}$$

共有 $3N$ 个动量积分,故

$$Z = \frac{1}{N!}\frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3N/2} = \frac{1}{N!}\left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\right]^N \tag{23.2.31}$$

可见,对无相互作用的独立粒子系统,Z 是单粒子配分函数的 N 次方,这一结果经常用到. 如果粒子被限制在面积为 A 上作二维平面运动,只有 $2N$ 个自由度,那么共有 $2N$ 个动量积分,则

$$Z = \frac{1}{N!}\frac{A^N}{(2\pi\hbar)^{2N}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{2N/2} = \frac{1}{N!}\left[\frac{2\pi mA}{(2\pi\hbar)^2\beta}\right]^N \tag{23.2.32}$$

例 23.2.2 固体晶格的振动.

解: 固体由于晶格离子的振动,可看成 $3N$ 个独立谐振子,在 21.4 节中,我们用 Boltzmann 统计,现在用正则分布来讨论. 固体总的振动能级为

$$E_{n_l} = \phi_0 + \sum_{l=1}^{3N}\hbar\omega_l\left(n_l + \frac{1}{2}\right) \quad (n_l = 0,1,2,\cdots) \tag{23.2.33}$$

其中 ϕ_0 是离子在平衡位置时离子-离子之间的相互作用能. 显然能量依赖于某个振动频率 ω_l 上占有的声子数 n_l. 系统的配分函数为

$$
\begin{aligned}
Z &= e^{-\beta\phi_0} \sum_{\{n_l\}} \exp(-\beta E_{\{n_l\}}) \\
&= e^{-\beta\phi_0} \sum_{\{n_l\}} \exp\left[-\beta \sum_{l=1}^{3N} \hbar\omega_l \left(n_l + \frac{1}{2}\right)\right] \\
&= e^{-\beta\phi_0} \sum_{\{n_l\}} \prod_l \exp\left[-\beta\hbar\omega_l \left(n_l + \frac{1}{2}\right)\right] \\
&= e^{-\beta\phi_0} \prod_l \sum_{n_l=0}^{\infty} \exp\left[-\beta\hbar\omega_l \left(n_l + \frac{1}{2}\right)\right] \\
&= e^{-\beta\phi_0} \prod_l \frac{\exp(-\beta\hbar\omega_l/2)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega_l)}
\end{aligned} \tag{23.2.34}
$$

由式(23.2.13),系统的内能为

$$
U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = U_0 + \sum_{l=1}^{3N} \frac{\hbar\omega_l}{\exp(\beta\hbar\omega_l) - 1} \tag{23.2.35}
$$

其中

$$
U_0 = \phi_0 + \sum_{l=1}^{3N} \frac{\hbar\omega_l}{2} \tag{23.2.36}
$$

一般 $U_0 < 0$,称为固体的结合能.式(23.2.35)与式(21.4.6)的结果是一致的.

23.3 巨正则分布、热力学关系和粒子数涨落

本节介绍系统与外界媒质有能量和粒子数交换的情况,但系统与外界媒质仍处于力学平衡(体积不变)、热学平衡(温度与外界温度相等)和化学平衡(化学势不变),即考虑定温、定容和定化学势的系统分布.

巨正则分布:具有确定 V、T 和 μ 的系统可设想为与一个大热源和大粒子源(简称为源)接触而达到平衡态的系统.系统与源可以交换能量和粒子,故可能的微观状态可具有不同的能量和粒子数.由这种系统的微观状态集合组成的统计系综称为**巨正则系综**.把系统与源合起来构成一个复合系统.显然复合系统可看成一个孤立系统,于是可应用等概率原理求得系统具有不同能量和粒子数的概率分布函数.复合系统是孤立系统,总能量 E_0 和总粒子数 N_0 守恒

$$
E_1 + E_2 = E_0, \quad N_1 + N_2 = N_0 \tag{23.3.1}
$$

但要注意的是:E_1 与 N_1 有关,即 $E_1(N_1)$.复合系统的微观状态数为系统和源的微观状态数之积,即

$$
\begin{aligned}
\Omega(E_0, N_0) &= \Omega_1(E_1, N_1)\Omega_2(E_2, N_2) \\
&= \Omega_1(E_1, N_1)\Omega_2(E_0 - E_1, N_0 - N_1)
\end{aligned} \tag{23.3.2}
$$

上式表示:复合系统的微观状态数是系统能量 E_1 和粒子数 N_1 的函数,可以写成

$\Omega(E_1,N_1)$. 由于复合系统微观状态的出现是等概率的，$\Omega(E_1,N_1)$越大，系统具有能量 E_1 和粒子数 N_1 的概率就越大. 因此系统具有能量 E_1 和粒子数 N_1 的概率正比于 $\Omega(E_1,N_1)$，即

$$\rho_{E_1,N_1} \sim \Omega(E_1,N_1) = \exp\left[\frac{S(E_1,N_1)}{k_B}\right] \tag{23.3.3}$$

其中 $S(E_1,N_1)$是复合系统的熵，得到上式已利用了式(23.1.15). 利用熵的广延量特性，复合系统的熵等于系统的熵与源的熵之和

$$\begin{aligned} S(E_1,N_1) &= S_1(E_1,N_1) + S_2(E_2,N_2) \\ &= S_1(E_1,N_1) + S_2(E_0-E_1,N_0-N_1) \end{aligned} \tag{23.3.4}$$

由于 $E_1 \ll E_0$ 和 $N_1 \ll N_0$，上式根据 E_1 和 N_1 展开

$$\begin{aligned} S(E_1,N_1) \approx & S_1(E_1,N_1) + S_2(E_0,N_0) \\ & - \left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{E_1,N_1=0} E_1 - \left(\frac{\partial S_2}{\partial N_2}\right)_{E_1,N_1=0} N_1 + \cdots \end{aligned} \tag{23.3.5}$$

由热力学关系 $\partial S_2/\partial E_2 = 1/T_2$，$\partial S_2/\partial N_2 = -\mu_2/T_2$ 且源与系统温度和化学势相等，代入上式

$$S(E_1,N_1) \approx S_1(E_1,N_1) + S_2(E_0,N_0) - \frac{E_1}{T_1} + \frac{N_1\mu_1}{T_1} \tag{23.3.6}$$

由方程(23.3.3)得到

$$\rho_{E_1,N_1} \sim \exp\left[\frac{S_1(E_1,N_1)}{k_B}\right]\exp\left(-\frac{E_1-N_1\mu_1}{k_BT_1}\right) \tag{23.3.7}$$

推导(23.3.7)式时，已把常量 $S_2(E_0,N_0)$忽略了. 再利用式(23.1.15)可以得到

$$\rho_{E_1,N_1} = C\Omega_1(E_1,N_1)\exp\left(-\frac{E_1-N_1\mu_1}{k_BT_1}\right) \tag{23.3.8}$$

其中比例常数 C 由归一化条件决定

$$\sum_{E_1,N_1}\rho_{E_1,N_1} = C\sum_{E_1,N_1}\Omega_1(E_1,N_1)\exp\left(-\frac{E_1-N_1\mu}{k_BT_1}\right) = 1 \tag{23.3.9}$$

令巨配分函数为

$$\tilde{Z} = \sum_{E_1,N_1}\Omega_1(E_1,N_1)\exp\left(-\frac{E_1-N_1\mu}{k_BT_1}\right) = \sum_{N_1}\exp\left(\frac{N_1\mu}{k_BT_1}\right)Z(N_1) \tag{23.3.10}$$

最后得到巨正则系综的分布函数为

$$\rho_{E_1,N_1} = \frac{\Omega_1(E_1,N_1)}{\tilde{Z}}\exp\left(-\frac{E_1-N_1\mu}{k_BT_1}\right) \tag{23.3.11}$$

去除下标 1 且设系统的能量是量子化的，即 E_λ，则

$$\rho_{E_\lambda,N} = \frac{\Omega(E_\lambda,N)}{\tilde{Z}}\exp[-(\beta E_\lambda + \alpha N)] \tag{23.3.12}$$

其中 $\alpha=-\beta\mu$. 上式表示：当系统与周围的媒质处于力学平衡、热学平衡和化学平衡时，系统处于能级 E_λ 且具有粒子 N 的概率分布. 上式是系统在能级 E_λ 上的概率，而能级 E_λ 的简并度为 $\Omega(E_\lambda, N)$，故处于能级 E_λ 的每个量子态的概率为

$$\rho_\lambda(N)=\frac{1}{\tilde{Z}}\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)] \tag{23.3.13}$$

巨配分函数改成对每个量子态的求和

$$\tilde{Z}=\sum_{N,\lambda}\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)]=\sum_N\exp(-\alpha N)Z(N) \tag{23.3.14}$$

系统的平均能量和粒子数为

$$\begin{aligned}U=\bar{E}&=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda,N}E_\lambda=\frac{1}{\tilde{Z}}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda,N)E_\lambda\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)]\\&=-\frac{1}{\tilde{Z}}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda,N)\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)]\\&=-\frac{1}{\tilde{Z}}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial\beta}=-\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial\beta}\end{aligned} \tag{23.3.15}$$

和

$$\begin{aligned}\bar{N}&=\sum_\lambda\rho_{E_\lambda,N}N=\frac{1}{\tilde{Z}}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda,N)N\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)]\\&=-\frac{1}{\tilde{Z}}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sum_\lambda\Omega(E_\lambda,N)\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)]\\&=-\frac{1}{\tilde{Z}}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial\alpha}=-\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial\alpha}\end{aligned} \tag{23.3.16}$$

热力学关系：其他宏观参数和热力学函数也可通过分布式(23.3.13)求得

1. 广义力 Y：是 $\partial E_i/\partial y$ 的系综平均

$$\begin{aligned}Y&=\frac{1}{\tilde{Z}}\sum_\lambda\frac{\partial E_\lambda}{\partial y}\exp[-\beta(E_\lambda-\mu N)]\\&=\frac{1}{\tilde{Z}}\left(-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial y}\right)\sum_\lambda\exp[-\beta(E_\lambda-\mu N)]=-\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial y}\end{aligned} \tag{23.3.17}$$

对简单的 p-V 系统

$$p=\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial V} \tag{23.3.18}$$

2. 熵函数：由 $TdS=dU-Ydy-\mu d\bar{N}$ 得到

$$\begin{aligned}dS&=\frac{1}{T}(dU-Ydy-\mu d\bar{N})\\&=k_B\left[-\beta d\left(\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial\beta}\right)+\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial y}dy+\alpha d\bar{N}\right]\end{aligned} \tag{23.3.19}$$

而

$$\mathrm{d}(\ln\widetilde{Z})=\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\beta}\mathrm{d}\beta+\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial y}\mathrm{d}y+\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\alpha}\mathrm{d}\alpha \tag{23.3.20}$$

代入式(23.3.19)得到

$$\begin{aligned}\mathrm{d}S&=k_{\mathrm{B}}\left[-\beta\mathrm{d}\left(\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\beta}\right)+\mathrm{d}(\ln\widetilde{Z})-\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\beta}\mathrm{d}\beta+\overline{N}\mathrm{d}\alpha+\alpha\mathrm{d}\overline{N}\right]\\&=k_{\mathrm{B}}\left[-\mathrm{d}\left(\beta\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\beta}\right)+\mathrm{d}(\ln\widetilde{Z})+\mathrm{d}(\alpha\overline{N})\right]\\&=k_{\mathrm{B}}\mathrm{d}\left[\alpha\overline{N}+\ln\widetilde{Z}-\beta\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\beta}\right]\end{aligned} \tag{23.3.21}$$

因此熵函数为

$$S=k_{\mathrm{B}}\left[\ln\widetilde{Z}-\alpha\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\alpha}-\beta\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\beta}\right] \tag{23.3.22}$$

3. 广势函数：由 $\Omega=U-TS-\mu N$ 得到(注意：与微观状态数 Ω 之区别)

$$\Omega=-k_{\mathrm{B}}T\ln\widetilde{Z};\quad \widetilde{Z}=\exp\left(-\frac{\Omega}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \tag{23.3.23}$$

利用上式，分布式(23.3.13)可以写成简洁的形式

$$\rho_{\lambda}(N)=\exp[\beta(\Omega-E_{\lambda})-\alpha N)] \tag{23.3.24}$$

巨正则分布应用范围比正则分布要广泛. 在涉及到系统的粒子数有涨落变化时，必须用巨正则分布讨论，正如在涉及到能量的涨落时，必须用正则分布代替微正则分布一样. 但对通常的宏观系统，只要不涉及到相变或临界点，粒子数涨落一般很小，巨正则分布与正则分布能得到同样的结果.

例 23.3.1 求理想气体的巨配分函数.

解： 由式(23.2.31)和(23.3.14)

$$\begin{aligned}\widetilde{Z}&=\sum_{N,\lambda}\exp[-(\beta E_{\lambda}+\alpha N)]\\&=\sum_{N}\frac{1}{N!}\left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^{3}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\exp(-\alpha)\right]^{N}\\&=\exp\left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^{3}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\exp(-\alpha)\right]\end{aligned} \tag{23.3.25}$$

于是由式(23.3.16)得到

$$\overline{N}=-\frac{\partial\ln\widetilde{Z}}{\partial\alpha}=\frac{V}{(2\pi\hbar)^{3}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\exp(-\alpha) \tag{23.3.26}$$

故立即得到理想气体的化学势

$$\mu=k_{\mathrm{B}}T\ln\frac{N}{V}\left[\frac{(2\pi\hbar)^{2}}{2\pi mk_{\mathrm{B}}T}\right]^{3/2} \tag{23.3.27}$$

例 23.3.2　用巨正则分布讨论准独立粒子系的量子统计.

解：　设系统的粒子数为 N,单粒子能级 $\{\varepsilon_i\}$ 上的分布为 $\{N_i\}$,系统的能量为

$$E\{N_i\} = \sum_{i=1}^{\infty}\varepsilon_i N_i \tag{23.3.28}$$

注意能量与分布有关. 由巨正则分布得到

$$\begin{aligned}\rho(\{N_i\}) &= \exp(\beta\Omega)\exp\left[-\beta\sum_{i=1}^{\infty}\varepsilon_i N_i - \alpha\sum_{i=1}^{\infty}N_i\right]\\ &= \exp(\beta\Omega)\prod_{i=1}^{\infty}\{\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}^{N_i}\end{aligned} \tag{23.3.29}$$

归一化条件为

$$\sum_{\{N_i\}}\rho_i(\{N_i\}) = \exp(\beta\Omega)\sum_{\{N_i\}}\prod_{i=1}^{\infty}\{\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}^{N_i} = 1 \tag{23.3.30}$$

即

$$\exp(-\beta\Omega) = \prod_{i=1}^{\infty}\sum_{N_i}\{\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}^{N_i} \tag{23.3.31}$$

分两种情况讨论：1. Fermi 子,N_i 只能是 0 或者 1；2. Bose 子,对 N_i 无限制. 于是,上式对 Fermi 子求和只有 2 项,而对 Bose 子,从 0 到 N 求和为等比级数,因 N 很大,故求和后可令 $N\to\infty$,最后得到

$$\exp(-\beta\Omega) = \begin{cases}\prod_{i=1}^{\infty}\{1+\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}, (\text{Fermi})\\ \prod_{i=1}^{\infty}\{1-\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}^{-1}, (\text{Bose})\end{cases} \tag{23.3.32}$$

即

$$-\beta\Omega = \begin{cases}\sum_i \ln\{1+\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}, (\text{Fermi})\\ -\sum_i \ln\{1-\exp[-(\beta\varepsilon_i+\alpha)]\}, (\text{Bose})\end{cases} \tag{23.3.33}$$

故系统的平均粒子数为

$$\overline{N} = -\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial\alpha} = \frac{\partial(\beta\Omega)}{\partial\alpha} = \begin{cases}\sum_i \dfrac{1}{\exp(\beta\varepsilon_i+\alpha)+1}, (\text{Fermi})\\ \sum_i \dfrac{1}{\exp(\beta\varepsilon_i+\alpha)-1}, (\text{Bose})\end{cases} \tag{23.3.34}$$

由于

$$N = \sum_{i=1}N_i, \quad \overline{N} = \sum_{i=1}\overline{N}_i \tag{23.3.35}$$

因此单粒子态上的平均粒子数为

$$\overline{N}_i = \begin{cases} \dfrac{1}{\exp(\beta\varepsilon_i+\alpha)+1}, (\text{Fermi}) \\ \dfrac{1}{\exp(\beta\varepsilon_i+\alpha)-1}, (\text{Bose}) \end{cases} \tag{23.3.36}$$

由于单粒子态上的平均粒子数只与能级有关,故单粒子能级上的平均粒子数为

$$\overline{N}_{\varepsilon_i}^{\text{F,B}} = \frac{g(\varepsilon_i)}{\exp(\beta\varepsilon_i+\alpha)\pm 1} \tag{23.3.37}$$

上式与第22章的结果是一致的.

粒子数涨落:下面来分析一下粒子数偏差$(N-\overline{N})^2$的系综平均$\overline{(N-\overline{N})^2}$,即粒子数涨落

$$\begin{aligned}\overline{(N-\overline{N})^2} &= \sum_\lambda \rho_\lambda(N)(N-\overline{N}^2) = \sum_\lambda \rho_\lambda(N)(N^2-2N\overline{N}+\overline{N}^2) \\ &= \sum_\lambda \rho_\lambda(N)N^2 - 2\overline{N}\sum_\lambda \rho_\lambda(N)N + \overline{N}^2 \\ &= \sum_\lambda \rho_\lambda(N)N^2 - 2\overline{N}\overline{N} + \overline{N}^2 = \sum_\lambda \rho_\lambda(N)N^2 - \overline{N}^2\end{aligned} \tag{23.3.38}$$

而

$$\begin{aligned}\sum_\lambda \rho_\lambda(N)N^2 &= \frac{1}{\tilde{Z}}\sum_\lambda N^2\exp[-(\beta E_\lambda+\alpha N)] \\ &= -\frac{1}{\tilde{Z}}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sum_\lambda N[-(\beta E_\lambda+\alpha N)] = -\frac{1}{\tilde{Z}}\frac{\partial(\tilde{Z}\overline{N})}{\partial\alpha} \\ &= -\frac{\overline{N}}{\tilde{Z}}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial\alpha} - \frac{\partial\overline{N}}{\partial\alpha} = -\overline{N}\frac{\partial\ln\tilde{Z}}{\partial\alpha} - \frac{\partial\overline{N}}{\partial\alpha} = \overline{N}^2 - \frac{\partial\overline{N}}{\partial\alpha}\end{aligned}$$

代入式(23.3.38)得到

$$\overline{(N-\overline{N})^2} = -\frac{\partial\overline{N}}{\partial\alpha} \tag{23.3.39}$$

粒子数的相对涨落为

$$\frac{\overline{(N-\overline{N})^2}}{\overline{N}^2} = -\frac{1}{\overline{N}^2}\frac{\partial\overline{N}}{\partial\alpha} = \frac{k_B T}{\overline{N}^2}\left(\frac{\partial\overline{N}}{\partial\mu}\right)_{T,V} \tag{23.3.40}$$

由式(20.3.30)上式化成

$$\frac{\overline{(N-\overline{N})^2}}{\overline{N}^2} = \frac{k_B T}{\overline{N}^2}\left(\frac{\partial\overline{N}}{\partial\mu}\right)_{T,V} = -\frac{k_B T}{\overline{N}^2}\left(\frac{\overline{N}}{V}\right)^2\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,\overline{N}} = \frac{k_B T}{V}\kappa_T \tag{23.3.41}$$

V正比于$\overline{N}\sim10^{23}$,当κ_T有限时,相对涨落很小.但在相变点$\kappa_T\to\infty$,粒子数的相对涨落就很大.液体在临界点附近的涨落导致光的强烈散射而产生临界乳光现象,将在下章介绍.

23.4 T-p 分布与特征函数

在正则分布情况，系统所处的条件是定温、定容和定粒子数，能量是可变的；在巨正则分布情况，系统所处的条件是定温、定容和定化学势，能量和粒子数是可变的. 本节介绍另一种情况，即定温、定压和定粒子数，而系统与外界媒质不仅有能量的交换，而且体积是可变的. 把系统与源合起来构成一个复合系统. 显然复合系统可看成一个孤立系统，于是可应用等概率原理求得系统具有不同能量和体积的概率分布函数. 复合系统是孤立系统，总能量 E_0 和总体积 V_0 守恒

$$E_1+E_2=E_0,\quad V_1+V_2=V_0 \tag{23.4.1}$$

复合系统的微观状态数为系统和源的微观状态数之积，即

$$\begin{aligned}\Omega(E_0,V_0)&=\Omega_1(E_1,V_1)\Omega_2(E_2,V_2)\\&=\Omega_1(E_1,V_1)\Omega_2(E_0-E_1,V_0-V_1)\end{aligned} \tag{23.4.2}$$

上式表示：复合系统的微观状态数是系统能量 E_1 和体积 V_1 的函数，可以写成 $\Omega(E_1,V_1)$. 由于复合系统微观状态的出现是等概率的，$\Omega(E_1,V_1)$越大，系统具有能量 E_1 和体积 V_1 的概率就越大. 因此系统具有能量 E_1 和体积 V_1 的概率正比于 $\Omega(E_1,V_1)$，即

$$\rho_{E_1,V_1}\sim\Omega(E_1,V_1)=\exp\left[\frac{S(E_1,V_1)}{k_B}\right] \tag{23.4.3}$$

其中 $S(E_1,V_1)$是复合系统的熵. 利用熵的广延量特性，复合系统的熵等于系统的熵与源的熵之和

$$\begin{aligned}S(E_1,V_1)&=S_1(E_1,V_1)+S_2(E_2,V_2)\\&=S_1(E_1,V_1)+S_2(E_0-E_1,V_0-V_1)\end{aligned} \tag{23.4.4}$$

由于 $E_1\ll E_0$ 和 $V_1\ll V_0$，上式根据 E_1 和 V_1 展开得到

$$\begin{aligned}S(E_1,V_1)\approx{}&S_1(E_1,V_1)+S_2(E_0,V_0)\\&-\left(\frac{\partial S_2}{\partial E_2}\right)_{E_1,V_1=0}E_1-\left(\frac{\partial S_2}{\partial V_2}\right)_{E_1,V_1=0}V_1+\cdots\end{aligned} \tag{23.4.5}$$

由热力学关系 $\partial S_2/\partial E_2=1/T_2$，$\partial S_2/\partial V_2=p_2/T_2$ 且源与系统温度和压强相等，代入上式

$$S(E_1,N_1)\approx S_1(E_1,N_1)+S_2(E_0,N_0)-\frac{E_1}{T_1}-\frac{p_1V_1}{T_1} \tag{23.4.6}$$

上式代入方程(23.4.3)得到

$$\rho_{E_1,V_1}\sim\exp\left[\frac{S_1(E_1,V_1)}{k_B}\right]\exp\left(-\frac{E_1+p_1V_1}{k_BT_1}\right) \tag{23.4.7}$$

推导上式时，已把常数 $S_2(E_0,V_0)$忽略了. 再利用式(23.1.15)可以得到

$$\rho_{E_1,V_1}=C\Omega_1(E_1,V_1)\exp\left(-\frac{E_1+p_1V_1}{k_BT_1}\right) \tag{23.4.8}$$

其中比例常数 C 由归一化条件决定

$$\int_0^\infty\sum_{E_1}\rho_{E_1,V_1}\mathrm{d}V_1=C\int_0^\infty\sum_{E_1}\Omega_1(E_1,V_1)\exp\left(-\frac{E_1+p_1V_1}{k_BT_1}\right)\mathrm{d}V_1=1 \tag{23.4.9}$$

这里把体积作为连续变量,求和用积分代替. 令配分函数为

$$Z'=\int_0^\infty\sum_{E_1}\Omega_1(E_1,V_1)\exp\left(-\frac{E_1+p_1V_1}{k_BT_1}\right)\mathrm{d}V_1 \tag{23.4.10}$$

最后得到分布函数为

$$\rho_{E_1,V_1}=\frac{\Omega_1(E_1,V_1)}{Z'}\exp\left(-\frac{E_1+p_1V_1}{k_BT_1}\right) \tag{23.4.11}$$

去除下标 1 且设系统的能量是量子化的,即 E_λ,则上式可改写成

$$\rho_{E_\lambda,V}=\frac{\Omega(E_\lambda,V)}{Z'}\exp[-\beta(E_\lambda+pV)] \tag{23.4.12}$$

上式表示系统处于能级 E_λ 且具有体积 V 的概率分布,称为 ***T-p* 分布**. 上式是系统在能级 E_λ 上的概率,而能级 E_λ 的简并度为 $\Omega(E_\lambda,V)$(注意:与 V 有关),故处于能级 E_λ 的每个量子态的概率为

$$\rho_\lambda(V)=\frac{1}{Z'}\exp[-\beta(E_\lambda+pV)] \tag{23.4.13}$$

而配分函数改成对每个量子态的求和

$$Z'=\int_0^\infty\sum_\lambda\exp[-\beta(E_\lambda+pV)]\mathrm{d}V \tag{23.4.14}$$

系统的平均能量和体积为

$$\begin{aligned}U=\bar{E}&=\int_0^\infty\sum_\lambda\rho_{E_\lambda,V}E_\lambda\mathrm{d}V=\frac{1}{Z'}\int_0^\infty\sum_\lambda E_\lambda\exp[-\beta(E_\lambda+pV)]\mathrm{d}V\\&=-\frac{1}{Z'}\frac{\partial}{\partial\beta}\int_0^\infty\sum_\lambda\exp[-\beta(E_\lambda+pV)]\mathrm{d}V=-\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\end{aligned} \tag{23.4.15}$$

和

$$\begin{aligned}\bar{V}&=\int_0^\infty\sum_\lambda\rho_\lambda(V)V\mathrm{d}V=\frac{1}{Z'}\int_0^\infty\sum_\lambda V\exp[-\beta(E_\lambda+pV)]\mathrm{d}V\\&=-\frac{1}{Z'}\frac{\partial}{\partial\gamma}\int_0^\infty\sum_\lambda\exp[-(\beta E_\lambda+\gamma V)]\mathrm{d}V=-\frac{\partial\ln Z'}{\partial\gamma}\end{aligned} \tag{23.4.16}$$

其中 $\gamma=\beta p$. 系统的其他宏观参数和热力学函数也可通过分布式(23.4.13)求得

1. 广义力 Y(压强除外):是 $\partial E_\lambda/\partial y$ 的系综平均

$$Y=\frac{1}{Z'}\int_0^\infty\sum_\lambda\frac{\partial E_\lambda}{\partial y}\exp[-\beta(E_\lambda+pV)]\mathrm{d}V$$
$$=\frac{1}{Z'}\left(-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial y}\right)\int_0^\infty\sum_\lambda\exp[-\beta(E_\lambda+pV)]\mathrm{d}V=-\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln Z'}{\partial y} \tag{23.4.17}$$

2. 熵函数:由 $T\mathrm{d}S=\mathrm{d}U-Y\mathrm{d}y+p\mathrm{d}V$ 得到

$$\mathrm{d}S=\frac{1}{T}(\mathrm{d}U-Y\mathrm{d}y+p\mathrm{d}V)$$
$$=k_\mathrm{B}\left[-\beta\mathrm{d}\left(\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\right)+\frac{\partial\ln Z'}{\partial y}\mathrm{d}y+\gamma\mathrm{d}V\right] \tag{23.4.18}$$

而

$$\mathrm{d}(\ln Z')=\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\mathrm{d}\beta+\frac{\partial\ln Z'}{\partial y}\mathrm{d}y+\frac{\partial\ln Z'}{\partial\gamma}\mathrm{d}\gamma \tag{23.4.19}$$

上式代入式(23.4.18)得到

$$\mathrm{d}S=k_\mathrm{B}\left[-\beta\mathrm{d}\left(\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\right)+\mathrm{d}(\ln Z')-\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\mathrm{d}\beta-\frac{\partial\ln Z'}{\partial\gamma}\mathrm{d}\gamma+\gamma\mathrm{d}V\right]$$
$$=k_\mathrm{B}\left[-\mathrm{d}\left(\beta\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\right)+\mathrm{d}(\ln Z'+\gamma V)\right]=k_\mathrm{B}\mathrm{d}\left[\ln Z'+\gamma V-\beta\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\right]$$

因此熵函数为

$$S=k_\mathrm{B}\left[\ln Z'+\gamma V-\beta\frac{\partial\ln Z'}{\partial\beta}\right] \tag{23.4.20}$$

3. 热力势函数:由 $G=U+pV-TS$ 得到

$$G=-k_\mathrm{B}T\ln Z' \tag{23.4.21}$$

利用上式,分布式(23.4.13)可以写成简洁的形式

$$\rho_\lambda(V)=\exp[\beta(G-E_\lambda-pV)] \tag{23.4.22}$$

由方程(23.2.26)、(23.3.24)和上式可见:分布总与相应的热力学特征函数相关.在定温、定容、定粒子数情况下,特征函数是自由能 F;在定温、定容、定化学势情况下,特征函数是广势函数 Ω;而在定温、定压、定粒子数情况下,特征函数是热力势函数 G.由三种分布的推导可看出,过程基本是类似的,因此这种方法可推广到一般的情况,得到其他物理量的概率分布公式.

23.5 量子系综:密度矩阵

由式(22.2.37),在极低温、高密度情况下,量子效应必须考虑.本章前四节中,

尽管我们用量子力学中能级的概念，但仍然用经典物理的概念来描述整个系统. 本节简单介绍量子系综理论. 所谓量子系综，就是系综中每个系统必须用量子力学的波函数来描述.

密度算符：在 14.5 节中，我们定义了量子态（称为**纯态**）ψ 的密度矩阵 ρ_{mn}. 本节把密度矩阵方法应用到量子系综. 设由 $M\gg1$ 个全同系统组成的系综，每个系统的特性用一个共同的 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 表征. 令 $\psi^k(\boldsymbol{r},t)(k=1,2,\cdots,M)$ 为系综内第 k 个系统在 t 时刻的归一波函数，其中 $\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_M)$ 为系统中 M 个粒子的位置矢量. $\psi^k(\boldsymbol{r},t)$ 满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^k(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=H\psi^k(\boldsymbol{r},t) \tag{23.5.1}$$

由 14.4 节讨论，在 $\hat{A}$ 表象中，波函数 $\psi^k(\boldsymbol{r},t)$ 可用 $\hat{A}$ 的本征函数系 $\{\varphi_n(\boldsymbol{r})\}$ 展开成

$$\psi^k(\boldsymbol{r},t)=\sum_n a_n^k(t)\varphi_n(\boldsymbol{r}) \tag{23.5.2}$$

其中

$$a_n^k(t)=\int\varphi_n^*(\boldsymbol{r})\psi^k(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{23.5.3}$$

展开系数随时间的变化为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n^k(t)}{\mathrm{d}t}&=\int\varphi_n^*(\boldsymbol{r})\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^k(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int\varphi_n^*(\boldsymbol{r})\hat{H}\psi^k(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\&=\int\varphi_n^*(\boldsymbol{r})\hat{H}\Big(\sum_m a_m^k(t)\varphi_m(\boldsymbol{r})\Big)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\sum_m H_{nm}a_m^k(t)\end{aligned} \tag{23.5.4}$$

其中

$$H_{nm}=\int\varphi_n^*(\boldsymbol{r})\hat{H}\varphi_m(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{23.5.5}$$

系数 $a_n^k(t)$ 的物理意义：系综的第 k 个系统处于本征态 φ_n 的概率幅，$|a_n^k(t)|^2$ 表示时刻 t 发现系综的第 k 个系统处于特定状态 φ_n 的概率. 定义量子系综的密度矩阵算符 $\hat{\rho}(t)$，其元素为

$$\rho_{mn}(t)=\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\left[a_m^k(t)a_n^{k*}(t)\right] \tag{23.5.6}$$

显然 ρ_{mn} 是 $[a_m^k(t)a_n^{k*}(t)]$ 的系综平均，对角元素 ρ_{nn} 是 $|a_n(t)|^2$ 的系综平均，而 $|a_n(t)|^2$ 本身就是量子力学的统计平均. 因此这里存在两个平均过程：1. 由于量子力学的统计平均；2. 由于系综的统计平均. 显然应该有归一化条件

$$\sum_n\rho_{nn}=1 \tag{23.5.7}$$

密度矩阵元 $\rho_{mn}(t)$ 随时间的变化为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\rho_{mn}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_m^k(t)}{\mathrm{d}t}a_n^{k*}(t)+a_m^k(t)\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n^{k*}(t)}{\mathrm{d}t}\right]$$

$$=\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\left\{\left[\sum_l H_{ml}a_l^k(t)\right]a_n^{k*}(t)-a_m^k(t)\left[\sum_l H_{nl}^* a_l^{k*}(t)\right]\right\}$$

$$=\sum_l\left[H_{ml}\rho_{ln}-\rho_{ml}H_{ln}\right]=(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H})_{mn} \tag{23.5.8}$$

得到上式,已利用了 $\hat{H}$ 的 Hermite 特性,即 $H_{nl}^*=H_{ln}$. (23.5.8)式即为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}}{\mathrm{d}t}=[\hat{H},\hat{\rho}] \tag{23.5.9}$$

显然上式是经典方程(6.2.14)的量子推广.

如果系统已处于平衡态,则相应的系综自然应该是稳定的,即 $\dot{\rho}_{mn}=0$,故 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 与密度算符 $\hat{\rho}$ 对易. 因此 $\hat{H}$ 和 $\hat{\rho}$ 必定有性质:1. $\hat{\rho}$ 是 $\hat{H}$ 的显函数,这样 $\hat{H}$ 与 $\hat{\rho}$ 显然对易;2. $\hat{H}$ 不显含时间,即

$$\hat{\rho}=\hat{\rho}(\hat{H});\quad \frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0 \tag{23.5.10}$$

如果取能量表象,式(23.5.5)变成 $H_{nm}=E_n\delta_{nm}$,于是由(23.5.4)得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_n^k(t)}{\mathrm{d}t}=E_n a_n^k(t) \tag{23.5.11}$$

即

$$a_n^k(t)=a_n^k(0)\exp\left(\frac{E_n}{\mathrm{i}\hbar}t\right) \tag{23.5.12}$$

代入式(23.5.6)

$$\rho_{mn}(t)=\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\left\{a_m^k(0)a_n^{k*}(0)\exp\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_m-E_n)t\right]\right\} \tag{23.5.13}$$

当 $m=n$ 时,对角元素为

$$\rho_{nn}=\frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}[\,|a_n^k(0)|^2] \tag{23.5.14}$$

而非对角元素 ρ_{mn} 是时间的显函数. 当系统已处于平衡态时,它们必须为零,即

$$\rho_{nm}=\rho_{nn}\delta_{nm} \tag{23.5.15}$$

ρ_{nn} 的意义很明显,它表示系统处于能量 E_n 本征态概率的系综平均.

在平衡态,密度算符在能量表象中可写成

$$\hat{\rho}=\sum_n|\varphi_n\rangle\rho_{nn}\langle\varphi_n| \tag{23.5.16}$$

从而

$$\rho_{kl}=\langle\varphi_k|\hat{\rho}|\varphi_l\rangle=\sum_n\langle\varphi_k|\varphi_n\rangle\rho_{nn}\langle\varphi_n|\varphi_l\rangle$$

$$= \sum_n \delta_{kn}\rho_{nn}\delta_{nl} = \rho_{kk}\delta_{kl} \tag{23.5.17}$$

即为式(23.5.15). 随便指出：式(23.5.16)的密度算符表示一个**混合态**. 所谓混合态就是纯态$|\varphi_n\rangle$经统计权重 $p_n \equiv \rho_{nn}$后的叠加态，它是纯态的非相干叠加.

力学量的期望值：显然任意一个力学量 G 的期望值为

$$\langle G\rangle = \frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\int \psi^{k*}\hat{G}\psi^k \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{23.5.18}$$

用 $a_n^k(t)$表示

$$\langle G\rangle = \frac{1}{M}\sum_{k=1}^{M}\left[\sum_{m,n} a_n^{k*}a_m^k G_{nm}\right] \tag{23.5.19}$$

其中

$$G_{nm} = \int \varphi_n^*(\boldsymbol{r})\hat{G}\varphi_m(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{23.5.20}$$

利用式(23.5.6)，式(23.5.19)可以写成简洁的形式

$$\langle G\rangle = \sum_{m,n}\rho_{nm}G_{nm} = \sum_m(\hat{\rho}\hat{G})_{mm} = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{G}) \tag{23.5.21}$$

取 $\hat{G}$ 为单位算符，则显然有 $\mathrm{tr}(\hat{\rho})=1$. 如果波函数 $\psi^k(\boldsymbol{r},t)$不是归一化的，那么

$$\langle G\rangle = \frac{\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{G})}{\mathrm{tr}(\hat{\rho})} \tag{23.5.22}$$

习　题　23

23.1　证明由 N 个独立粒子构成的系统总配分函数是单粒子配分函数的 N 次方.（提示：设单粒子能级为$\{\varepsilon_i\}$，分布为$\{N_i\}$，系统总能量为

$$E = \sum_{i=1} N_i\varepsilon_i$$

总配分函数为

$$Z = \sum_s \exp(-\beta E_s) = \sum_{\{N_i\}}\exp\left(-\beta\sum_{i=1} N_i\varepsilon_i\right)$$

$$= \sum_{\{N_i\}}\prod_{i=1}[\exp(-\beta\varepsilon_i)]^{N_i}$$

$$= \prod_{i=1}^{N}\sum_{N_i=1}^{\infty}[\exp(-\beta\varepsilon_i)]^{N_i} = \left[\sum_{i=1}^{\infty}\exp(-\beta\varepsilon_i)\right]^N$$

如果考虑粒子的全同性和能级$\{\varepsilon_i\}$简并度$\{g_i\}$，那么

$$Z = \frac{1}{N!}\left[\sum_{i=1}^{\infty} g_i\exp(-\beta\varepsilon_i)\right]^N)$$

23.2　用正则分布证明系统的熵可表示为

$$S=-k_B\sum_{\lambda}\rho_{\lambda}\ln\rho_{\lambda}$$

其中 ρ_{λ} 是系统处在量子态 λ 的概率.（提示：系统处在量子态 λ 的概率为

$$\rho_{\lambda}=\frac{1}{Z}\exp(-\beta E_{\lambda})$$

故 $\ln\rho_{\lambda}=-(\ln Z+\beta E_{\lambda})$，然后求 $\sum\limits_{\lambda}\rho_{\lambda}\ln\rho_{\lambda}$，由正则分布，系统的熵为

$$S=k_B[\ln Z+\beta\bar{E}]$$

注意

$$\bar{E}=\sum_{\lambda}\rho_{\lambda}E_{\lambda})$$

23.3　由正则分布证明，由 N 个粒子构成的经典系统遵守广义能量均分定理，即

$$\overline{x_i\frac{\partial H}{\partial x_k}}=\delta_{ik}k_BT$$

其中 H 是系统的 Hamilton 函数

$$H(p,q)=H(p_1,p_2,\cdots,p_{3N};q_1,q_2,\cdots,q_{3N})$$

x_i 和 x_k 是 $6N$ 个广义坐标和广义动量中的任一个.（提示：由正则分布，平均值为

$$\overline{x_i\frac{\partial H}{\partial x_k}}=\frac{\int x_i\frac{\partial H}{\partial x_k}\exp[-\beta H(p,q)]\mathrm{d}\Omega}{\int\exp[-\beta H(p,q)]\mathrm{d}\Omega}$$

式中 $\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\cdots\mathrm{d}p_{3N}\cdot\mathrm{d}q_1\mathrm{d}q_2\cdots\mathrm{d}q_{3N}$，利用 $\partial x_i/\partial x_k=\delta_{ik}$，对上式分子分部积分得到

$$\begin{aligned}&\int x_i\frac{\partial H}{\partial x_k}\exp[-\beta H(p,q)]\mathrm{d}x_k\\&=-\frac{1}{\beta}x_i\exp[-\beta H(p,q)]\Big|_{x_k=-\infty}^{x_k=+\infty}+\frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial x_i}{\partial x_k}\exp(-\beta H)\mathrm{d}x_k\\&=\frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_{ik}\exp(-\beta H)\mathrm{d}x_k=\delta_{ik}\frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\beta H)\mathrm{d}x_k\end{aligned}$$

注意：广义能量均分定理对存在相互作用的系统也成立）

23.4　由广义能量均分定理证明：由 N 个粒子组成的经典系统遵守位力定理

$$\sum_{i=1}^{3N}\overline{q_iF_i}=-3Nk_BT$$

其中 q_i 是广义坐标，$\overline{q_iF_i}$ 为系综平均；F_i 是作用在第 i 个自由度上的力，满足 Hamilton 正则方程

$$F_i\equiv\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

对经典的非相对论粒子，证明位力定理可写成

$$2\overline{K}+\sum_{i=1}^{3N}\overline{q_iF_i}=0$$

（提示：取上题中 $x_i=x_k=q_i$，且注意有 $3N$ 个自由度，求和从 1 到 $3N$；对经典非相对论粒子，由能量均分定理，每个自由度的平均动能为 $\overline{K}_i=k_{\rm B}T/2$，粒子的总动能为

$$\overline{K}=\sum_{i=1}^{3N}\overline{K}_i=\frac{3}{2}Nk_{\rm B}T.$$

于是可得到相应的结果）

23.5　一个独立粒子系统由 N 个相对论粒子组成.（1）求状态方程；（2）内能；（3）与非相对论情况比较.（提示：能量—动量关系为 $\varepsilon=cp$，系统的总能量为

$$E(p)=\sum_{i=1}^{3N}cp_i$$

与空间位置无关，故配分函数为

$$\begin{aligned}Z&=\frac{1}{N!}\frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}}\int\exp[-\beta E(p,q)]\mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\cdots\mathrm{d}p_{3N}\\&=\frac{1}{N!}\frac{V^N}{(2\pi\hbar)^{3N}}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}4\pi p^2\exp(-\beta cp)\mathrm{d}p\right]^N\\&=\frac{1}{N!}\left[\frac{8\pi V}{(2\pi\hbar c\beta)^3}\right]^3\end{aligned}$$

积分在球坐标中进行. 自由能 $F=-k_{\rm B}T\ln Z$；$\mathrm{d}F=-p\mathrm{d}V-S\mathrm{d}T$，得到状态方程）

答案：（1）状态方程 $pV=Nk_{\rm B}T$；（2）$U=3Nk_{\rm B}T$；（3）状态方程相同，内能是非相对论气体的 2 倍.

23.6　考虑单原子气体在金属表面的吸附，气体原子在吸附状态时能量下降 Φ，吸附原子可在金属表面作二维自由运动，忽略气体原子之间的相互作用. 设气体体积为 V，压强为 p，温度为 T，并与金属处于热平衡. 求吸附在金属表面的气体原子面密度.（提示：设气体中原子数为 $N^{\rm g}$，吸附在金属上的原子数为 $N^{\rm s}$，体系的总能量为

$$E=E_{\rm g}+E_{\rm s}=\sum_{i=1}^{3N^{\rm g}}\frac{p_i^2}{2m}+\sum_{i=1}^{2N^{\rm s}}\frac{p_i^2}{2m}-N_{\rm s}\Phi$$

自由原子作三维运动，有 $3N^{\rm g}$ 个自由度，吸附原子作二维运动，有 $2N^{\rm g}$ 个自由度，配分函数分别为

$$Z_{\rm g}=\frac{1}{N^{\rm g}!}\left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2}\right]^{N^{\rm g}}$$

$$Z_{\rm s}=\frac{1}{N^{\rm s}!}\left[\frac{2\pi mA}{(2\pi\hbar)^2\beta}\exp(\beta\Phi)\right]^{N^{\rm s}}$$

总配分函数 $Z=Z_gZ_s$，系统的自由能 $F=-k_BT\ln Z$；然后求化学势

$$\mu_g=\frac{\partial F}{\partial N^g},\quad \mu_s=\frac{\partial F}{\partial N^s}$$

平衡条件 $\mu_s=\mu_g$)

答案：$n=\dfrac{N_s}{A}=\dfrac{2\pi\hbar}{\sqrt{2\pi mk_BT}}\dfrac{N_g}{V}\exp\left(\dfrac{\Phi}{k_BT}\right)$；气体状态方程：$pV=N_gk_BT$.

23.7 体积为 V_1 的容器内有单原子理想气体，温度为 T，压强为 p_1，分子数为 N.(1) 求自由能 $F=-k_BT\ln Z$；(2) 考虑具有相同粒子数的另一个容器，温度也是 T，但压强为 p_2，体积为 V_2，求两气体的总熵；(3) 把两容器连接起来，使气体自由混合，求总熵的变化；(4) 当 $p_1=p_2$ 和 $V_1=V_2$ 时，总熵的变化是多少？(提示：混合前

$$S_1=\frac{3}{2}Nk_B\ln T+Nk_B\ln\frac{V_1}{N}+\frac{3}{2}Nk_B\left[\frac{5}{3}+\ln\left(\frac{2\pi mk_B}{(2\pi\hbar)^2}\right)\right]$$

S_2 有类似的表达式，由熵的可加性，$S=S_1+S_2$；自由混合后，总内能不变，故温度不变，而体积为 $V=V_1+V_2$，粒子数为原来的二倍)

答案：$\Delta S=2Nk_B\ln\dfrac{V_1+V_2}{\sqrt{V_1V_2}}=2Nk_B\ln\dfrac{p_1+p_2}{\sqrt{p_1p_2}}$

当 $V_1=V_2$ 或者 $p_1=p_2$ 时，$\Delta S=0$.

23.8 晶格中有 N 个近独立的离子，每个离子的自旋为 1/2，磁矩为 μ_0，系统处于均匀外场 B 中，温度为 T.(1) 求配分函数；(2) 系统的熵；(3) 平均能量；(4) 平均磁矩和磁矩的涨落.(提示：两能级系统 $\varepsilon_{1,2}=\pm\mu_0B$. 由习题 23.1，系统的总配分函数为 $Z=[\exp(\beta\mu_0B)+\exp(-\beta\mu_0B)]^N$)

答案：$S=Nk_B\{\ln[\exp(\beta\mu_0B)+\exp(-\beta\mu_0B)]-\beta\mu_0B\tanh(\beta\mu_0B)\}$

$\overline{E}=-N\mu_0B\tanh(\beta\mu_0B)$；$\overline{M}=N\mu_0\tanh(\beta\mu_0B)$

单个磁矩的涨落

$$\overline{(\Delta m)^2}=\overline{m^2}-(\overline{m})^2=\mu_0^2-\mu_0^2\tanh^2(\beta\mu_0B)=\frac{\mu_0^2}{\cosh^2(\beta\mu_0B)}$$

对于整个系统

$$\overline{(\Delta M)^2}=N\overline{(\Delta m)^2};\sqrt{\overline{(\Delta M)^2}}=\sqrt{N}\frac{\mu_0}{\cosh(\beta\mu_0B)}.$$

23.9 证明 Boltzmann 气体的巨配分函数可写成

$$\widetilde{Z}=\exp\left\{\sum_{i=1}^{\infty}\exp[-(\alpha+\beta\varepsilon_i)]\right\}$$

$\{\varepsilon_i\}$ 为单粒子能级.(提示：巨配分函数与正则分布的配分函数关系为

$$\widetilde{Z}=\sum_{N=0}^{\infty}\exp(-N\alpha)Z(N)$$

由 23.1 题

$$Z(N)=\frac{1}{N!}\Big[\sum_{i=1}^{\infty}g_i\exp(-\beta\varepsilon_i)\Big]^N)$$

23.10 用巨正则分布证明系统的熵可表示为

$$S=-k_B\sum_N\sum_\lambda\rho_\lambda(N)\ln\rho_\lambda(N)$$

其中 $\rho_\lambda(N)$是系统具有粒子数 N 且处在量子态 λ 的概率.(提示:系统具有粒子数 N 且处在量子态 λ 的概率为

$$\rho_\lambda(N)=\frac{1}{\widetilde{Z}}\exp[-(\alpha N+\beta E_\lambda)]$$

故 $\ln\rho_\lambda(N)=-(\ln\widetilde{Z}+\alpha N+\beta E_\lambda)$,然后求

$$\sum_N\sum_\lambda\rho_\lambda(N)\ln\rho_\lambda(N)$$

而由巨正则分布,系统的熵为 $S=k_B[\ln Z+\alpha\overline{N}+\beta\overline{E}]$,注意关系

$$\overline{E}=\sum_N\sum_\lambda\rho_\lambda(N)E_\lambda;\quad \overline{N}=\sum_N\sum_\lambda\rho_\lambda(N)N)$$

第 24 章　涨落、关联和局部细致平衡

在上一章中，我们分别从正则分布和巨正则分布求出了能量涨落和粒子数涨落. 但必须注意正则分布的条件是定温、定容和定粒子数，所求得的能量涨落公式也必须满足这些条件. 事实上，粒子数的涨落必定引起能量的涨落. 一个量的涨落引起另一个量的涨落，称为**涨落关联**. 本章第一节首先介绍涨落的准热力学理论，直接给出在一定宏观条件下热力学量涨落值的概率分布. 根据这个概率分布容易计算宏观量的涨落以及涨落关联. 然后介绍涨落的空间和时间关联. 最后一节，介绍系统从非平衡态趋向平衡态的条件，即**局部细致平衡**.

24.1　涨落的准热力学理论和乳光现象

统计物理学认为，宏观量是相应微观量在满足给定条件的系统所有可能的微观状态上的平均值，即

$$\overline{B} = \langle B \rangle = \sum_{\lambda} \rho_{\lambda} B_{\lambda} \tag{24.1.1}$$

其中 ρ_{λ} 是系统处于微观状态 λ 的概率，B_{λ} 是微观量 B 在微观态 λ 的值. 既然宏观量是微观量的统计平均值，就存在与平均值的偏差，即$(B_{\lambda}-\overline{B})$. 显然偏差的平均值为

$$\overline{(B_{\lambda}-\overline{B})} = \sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(B_{\lambda}-\overline{B}) = \sum_{\lambda} \rho_{\lambda} B_{\lambda} - \sum_{\lambda} \rho_{\lambda} \overline{B} = \overline{B} - \overline{B} = 0 \tag{24.1.2}$$

因此一般用均方偏差

$$\sqrt{\overline{(B_{\lambda}-\overline{B})^2}} = \sqrt{\sum_{\lambda} \rho_{\lambda}(B_{\lambda}-\overline{B})^2} = \sqrt{\overline{B^2}-(\overline{B})^2} \tag{24.1.3}$$

来表达物理量 B 相对平均值 $\overline{B}$ 的涨落. 如果知道系统处于各状态的概率，就可以计算宏观量的涨落.

对某些物理量(如能量、体积和粒子数)，存在相应的微观量，涨落的含义比较清楚，但温度和熵等不存在相应的微观量，涨落的意义为：设系统能量、体积和粒子数的平均值为 $\overline{E}$、$\overline{V}$ 和 $\overline{N}$，相应的熵为 $S(\overline{E},\overline{V},\overline{N})$；当能量、体积和粒子数取涨落值 E、V 和 N 时，相应的熵为 $S(E,V,N)$，熵的涨落定义为

$$\Delta S = S(E,V,N) - S(\overline{E},\overline{V},\overline{N}) \tag{24.1.4}$$

考虑系统与源组成复合的孤立系统. 复合系统的总能量、总体积和总粒子数为

常数，因此系统与源相应量的偏差满足关系

$$\Delta E_1 + \Delta E_2 = 0, \quad \Delta V_1 + \Delta V_2 = 0, \quad \Delta N_1 + \Delta N_2 = 0 \tag{24.1.5}$$

设系统与源的参量取平均值和涨落值时，孤立系统的熵和微观状态数分别为($\bar{S}$, $\bar{\Omega}$)和(S,Ω)，它们满足

$$\bar{S} = k_B \ln\bar{\Omega}, \quad S = k_B \ln\Omega \tag{24.1.6}$$

由孤立系统的等概率原理，系统的参量取涨落值的概率应该为

$$\rho_\Delta \sim \frac{\Omega}{\bar{\Omega}} = \exp\left[\frac{(S-\bar{S})}{k_B}\right] = \exp\left(\frac{\Delta S}{k_B}\right) \tag{24.1.7}$$

由熵的广延性，忽略系统与源接触表面的相互作用，应该有

$$\Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2 \tag{24.1.8}$$

另一方面，系统与源处于平衡状态，具有相同的温度、压强和化学势，存在热力学关系

$$T\Delta S_2 = \Delta E_2 + p\Delta V_2 - \mu\Delta N_2 \tag{24.1.9}$$

由上式和方程(24.1.5)，源的熵涨落可表示为

$$\Delta S_2 = -\frac{\Delta E_1 + p\Delta V_1 - \mu\Delta N_1}{T} \tag{24.1.10}$$

代入方程(24.1.7)，得到用系统涨落表示的涨落分布

$$\rho_\Delta \sim \exp[-\beta(\Delta E_1 - T\Delta S_1 + p\Delta V_1 - \mu\Delta N_1)] \tag{24.1.11}$$

去除下标后，得到

$$\rho_\Delta \sim \exp[-\beta(\Delta E - T\Delta S + p\Delta V - \mu\Delta N)] \tag{24.1.12}$$

注意：系统的独立变量只有三个. 如取 S、V 和 N 为独立变量，则 $E=E(S,V,N)$，在平均值附近展开到二阶

$$\begin{aligned} E \approx\ & \bar{E}(\bar{S},\bar{V},\bar{N}) + T\Delta S - p\Delta V + \mu\Delta N \\ & + \frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2}\right)_0 (\Delta S)^2 + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial V^2}\right)_0 (\Delta V)^2 + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial N^2}\right)_0 (\Delta N)^2 \right. \\ & \left. + 2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S\partial V}\right)_0 \Delta S\Delta V + 2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S\partial N}\right)_0 \Delta S\Delta N + 2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial V\partial N}\right)_0 \Delta V\Delta N\right] \end{aligned} \tag{24.1.13}$$

式中下标表示在平均值取值. 式(24.1.13)的推导已利用关系

$$T = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_0; \quad p = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_0; \quad \mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_0 \tag{24.1.14}$$

进一步，式(24.1.13)可改写成

$$\begin{aligned} & \Delta E - T\Delta S + p\Delta V - \mu\Delta N \\ & = \frac{1}{2}\Delta S\left[\frac{\partial}{\partial S}\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_0 \Delta S + \frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_0 \Delta V + \frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_0 \Delta N\right] \end{aligned}$$

$$
+\frac{1}{2}\Delta V\left[\frac{\partial}{\partial S}\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_0\Delta S+\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_0\Delta V+\frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_0\Delta N\right]
$$

$$
+\frac{1}{2}\Delta N\left[\frac{\partial}{\partial S}\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_0\Delta S+\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_0\Delta V+\frac{\partial}{\partial N}\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_0\Delta N\right]
$$

$$
=\frac{1}{2}(\Delta S\Delta T-\Delta p\Delta V+\Delta\mu\Delta N)
$$

因此得到涨落分布公式

$$
\rho_\Delta\sim\exp\left[-\frac{1}{2}\beta(\Delta S\Delta T-\Delta p\Delta V+\Delta\mu\Delta N)\right] \tag{24.1.15}
$$

注意:上式中仍然只有三个独立变量.如取 T、V 和 N,则

$$
\begin{aligned}
\Delta S&=\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N}\Delta T+\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{T,N}\Delta V+\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{T,V}\Delta N\\
&=\frac{C_V}{T}\Delta T+\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}\Delta V-\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{V,N}\Delta N
\end{aligned} \tag{24.1.16}
$$

$$
\Delta p=\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{V,N}\Delta T+\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N}\Delta V+\left(\frac{\partial p}{\partial N}\right)_{T,V}\Delta N \tag{24.1.17}
$$

$$
\Delta \mu=\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{V,N}\Delta T+\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{T,N}\Delta V+\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{T,V}\Delta N \tag{24.1.18}
$$

以上三式代入方程(24.1.15)得到

$$
\begin{aligned}
\rho_\Delta\sim\exp\frac{1}{2}\beta\Big[&-\frac{C_V}{T}(\Delta T)^2+\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N}(\Delta V)^2\\
&+2\left(\frac{\partial P}{\partial N}\right)_{T,V}\Delta V\Delta N-\left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{T,V}(\Delta N)^2\Big]
\end{aligned} \tag{24.1.19}
$$

上式表明粒子数的涨落与体积的涨落是关联的.根据 20.3 节的热力学关系,上式可化成

$$
\rho_\Delta\sim\exp\left\{\frac{1}{2}\beta\left[-\frac{C_V}{T}(\Delta T)^2+N^2\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_{T,N}\left(\Delta\frac{V}{N}\right)^2\right]\right\} \tag{24.1.20}
$$

其中比例系数可由归一化条件决定.由上式,温度和 V/N 的涨落为

$$
\overline{(\Delta T)^2}=\frac{k_B T^2}{C_V}\sim\frac{1}{N}\to 0 \tag{24.1.21}
$$

$$
\overline{\left(\Delta\frac{V}{N}\right)^2}=-\frac{k_B T}{N^2}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,N} \tag{24.1.22}
$$

如果系统的粒子数不变

$$
\overline{(\Delta V)^2}=-k_B T\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \tag{24.1.23}
$$

反之,如果系统的体积不变

$$\overline{(\Delta N)^2} = -k_B T\left(\frac{N}{V}\right)^2\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,N} \tag{24.1.24a}$$

与第 23.3 节的结果相同. 粒子数的涨落可以转换为粒子数密度 $n=N/V$ 或体密度 $\rho=mn$(m 为分子量)的涨落,上式两边除以 V 得到

$$\overline{\left(\frac{\Delta n}{n}\right)^2} = \overline{\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^2} = -k_B T\frac{1}{V^2}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = k_B T\kappa_T \tag{24.1.24b}$$

在相变点 $\kappa_T\to\infty$,密度涨落很大. 由下列关系可以求能量的涨落

$$\Delta E = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N}\Delta T + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{T,N}\Delta V + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{T,V}\Delta N \tag{24.1.25}$$

为了方便,假定两种情况:

1. 系统粒子数不变

$$\overline{(\Delta E)^2} = C_V^2\,\overline{(\Delta T)^2} + 2C_V\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T\overline{\Delta V\Delta T} + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T^2\overline{(\Delta V)^2} \tag{24.1.26}$$

因式(24.1.19)中 ΔV 和 ΔT 没有交叉项,故

$$\overline{\Delta V\Delta T} = \overline{\Delta V}\cdot\overline{\Delta T} = 0 \tag{24.1.27}$$

由式(24.1.21)和(24.1.23)

$$\overline{(\Delta E)^2} = k_B T^2 C_V - k_B T\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T^2\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \tag{24.1.28}$$

2. 系统体积不变

$$\overline{(\Delta E)^2} = C_V^2\,\overline{(\Delta T)^2} + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{T,V}^2\overline{(\Delta N)^2} + 2C_V\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{T,V}\overline{\Delta N\Delta T} \tag{24.1.29}$$

同样$\overline{\Delta N\Delta T}=0$,而

$$\overline{(\Delta E)^2} = k_B T^2 C_V - k_B T\left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_T^2\left(\frac{N}{V}\right)^2\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,N} \tag{24.1.30}$$

上式和式(24.1.28)包含两项:第一项是由于系统与源交换能量引起的涨落,与式(23.2.15)一致;第二项是由于粒子(或体积)涨落而引起的能量涨落.

由方程(24.1.16)、(24.1.17)和(24.1.21),可以求涨落的关联(为了简单仍然设系统的粒子数不变)

$$\overline{\Delta S\Delta T} = \frac{C_V}{T}\overline{(\Delta T)^2} + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\overline{\Delta V\Delta T} = k_B T \tag{24.1.31}$$

$$\overline{\Delta p\Delta T} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\overline{(\Delta T)^2} + \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T\overline{\Delta V\Delta T} = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\frac{k_B T^2}{C_V} \tag{24.1.32}$$

在涨落的公式(24.1.15)中,如果以其他热力学量(包括态函数熵、化学势和内能)为独立变数,就可求得相应的涨落分布. 以上介绍了 p-V 系统,对一般的系统,只要给出功的形式,不难作出推广(见习题 24.3 和 24.4).

例 24.1.1 临界点的光散射.

解: 考虑体积 V 的宏观均匀介质(气体或者液体),当 $\lambda \gg V^{1/3}$,由第 12 章的讨论,宏观均匀介质对光的散射可看作 Rayleigh 散射.因此,由习题 12.2,散射截面为

$$\sigma \sim \frac{\omega^4 a^6}{c^4}\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}\right)^2 \sim \frac{\omega^4 a^6}{c^4}\left(\frac{\delta n}{n}\right)^2 \tag{24.1.33}$$

其中 n 为光的折射率,一般折射率的变化正比于密度的变化,即

$$\frac{\delta n}{n} \sim \frac{\delta \rho}{\rho} \tag{24.1.34}$$

由方程(24.1.24b)

$$\overline{\left(\frac{\delta n}{n}\right)^2} = \overline{\left(\frac{\delta \rho}{\rho}\right)^2} = -k_{\mathrm{B}} T \frac{1}{V^2}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = k_{\mathrm{B}} T \kappa_T \tag{24.1.35}$$

因此光散射强度为

$$\sigma \sim \frac{\omega^4 V^2}{c^4}\left(\frac{\delta n}{n}\right)^2 \sim \frac{\omega^4 V^2}{c^4} k_{\mathrm{B}} T \kappa_T \tag{24.1.36}$$

当温度变化达到临界点的附近时,$\kappa_T \to \infty$,因此光散射特别强烈,介质呈现半透明状态,称为**乳光现象**.

24.2 涨落的空间关联:Landau 唯象理论

上节介绍了整个系统物理量的涨落.本节介绍物理量涨落的空间相关性.物理量的空间相关性源于两部分:一部分是由于粒子间的相互作用,一个地方的粒子变动会牵动其邻近部分的粒子,这种相关性称为**动力学相关性**;另一部分是由于微观粒子的全同性所导致的量子效应,如第 17 章表明的,即使对于独立粒子仍然会产生排斥相关性(Fermi 子)和吸引相关性(Bose 子),这种相关性称为**统计相关性**.

设系统处于平衡状态,物理量是空间的函数 $A(\boldsymbol{r})$(即使是均匀系统,由于各点的涨落不同,也可认为物理量是空间的函数),它的系综平均值为 $\overline{A(\boldsymbol{r})}$(注意不是空间平均),而涨落为 $\Delta A(\boldsymbol{r}) = A(\boldsymbol{r}) - \overline{A(\boldsymbol{r})}$,显然 $\overline{\Delta A(\boldsymbol{r})} = 0$,但平方涨落 $\overline{[\Delta A(\boldsymbol{r})]^2}$ 有确定的值.问题是:空间不同两点 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 的涨落有什么关联呢?为此定义点 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}'$ 涨落的相关函数

$$g_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \overline{\Delta A(\boldsymbol{r}) \Delta A(\boldsymbol{r}')} \tag{24.2.1}$$

如果 $\boldsymbol{r}$ 点 $A(\boldsymbol{r})$ 的涨落与 $\boldsymbol{r}'$ 点 $A(\boldsymbol{r}')$ 涨落无关,则

$$g_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \overline{\Delta A(\boldsymbol{r}) \Delta A(\boldsymbol{r}')} = \overline{\Delta A(\boldsymbol{r})} \cdot \overline{\Delta A(\boldsymbol{r}')} = 0 \tag{24.2.2}$$

因此 $g_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的大小反映了两点涨落的关联程度.当然也可以定义物理量 $A(\boldsymbol{r})$ 和 $B(\boldsymbol{r})$ 的交叉空间相关函数

$$g_{AB}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \overline{\Delta A(\boldsymbol{r})\Delta B(\boldsymbol{r}')} \tag{24.2.3}$$

我们仅考虑均匀的流体系统，$A(\boldsymbol{r})$为粒子数密度 $n(\boldsymbol{r})$. 对均匀系统，$g_{nn}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$应该是距离$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$的函数，即

$$g_{nn}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|) \tag{24.2.4}$$

下面在 Fourier 域中求关联函数 $g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)$的表达式. 对 $n(\boldsymbol{r})$作 Fourier 级数展开(为了方便，先讨论级数，然后再过渡到积分)

$$n(\boldsymbol{r}) - \bar{n} = \frac{1}{V}\sum_k n_k \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{24.2.5}$$

其中 $\bar{n}$ 为常数. 注意到 $n(\boldsymbol{r})-\bar{n}$ 是实数，上式两边取复共轭得到

$$n(\boldsymbol{r}) - \bar{n} = \frac{1}{V}\sum_k n_k^* \exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) = \frac{1}{V}\sum_k n_{-k}^* \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{24.2.6}$$

故 $n_k^* = n_{-k}$. 于是

$$\begin{aligned}\overline{|n_k|^2} &= \iint \overline{[n(\boldsymbol{r})-\bar{n}][n(\boldsymbol{r}')-\bar{n}]}\exp[-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= \iint g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\exp[-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned} \tag{24.2.7}$$

令 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$，上式先对 $\boldsymbol{r}$ 积分

$$\begin{aligned}\overline{|n_k|^2} &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \int g_{nn}(|\boldsymbol{R}|)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3\boldsymbol{R} \\ &= V\int g_{nn}(|\boldsymbol{R}|)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3\boldsymbol{R} \equiv V g_{nn}(\boldsymbol{k})\end{aligned} \tag{24.2.8}$$

其中 $g_{nn}(\boldsymbol{k})$是关联函数的 Fourier 积分

$$g_{nn}(\boldsymbol{k}) = \int g_{nn}(|\boldsymbol{R}|)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3\boldsymbol{R} \tag{24.2.9}$$

上式的逆 Fourier 变换为

$$\begin{aligned}g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|) &= \frac{1}{V}\sum_k g_{nn}(\boldsymbol{k})\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')] \\ &= \frac{1}{V^2}\sum_k \overline{|n_k|^2}\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\end{aligned} \tag{24.2.10}$$

因此一旦求得了$\overline{|n_k|^2}$，就得到了关联函数 $g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)$.

对流体系统，可选择温度 T 和粒子数密度 n 为独立变量. 由上节的讨论，温度与粒子数密度的涨落不相关，故在分析粒子数密度涨落时，可假定温度不变. 设系统的总体积和总粒子数不变，系统的总自由能变化为

$$\Delta F = \Delta(E - TS) = \Delta E - T\Delta S \tag{24.2.11}$$

代入式(24.1.12)，并且注意到系统的总体积和总粒子数不变($\Delta V=\Delta N=0$)

$$\rho_\Delta \sim \exp(-\beta\Delta F) \tag{24.2.12}$$

上式给出由于涨落引起系统内部不均匀而导致的自由能涨落的概率分布. 自由能

F 是广延量,可令总自由能的涨落为

$$\Delta F = F - \overline{F} = \int (f - \overline{f}) \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \tag{24.2.13}$$

其中 $\Delta f = f - \overline{f}$ 为自由能密度的涨落. 对均匀系统, Δf 仅是粒子数密度的函数,但由于涨落的存在,我们必须考虑系统的非均匀性. 因此 Δf 还是粒子数密度空间导数的函数,即

$$\Delta f = \Delta f(T, n, \boldsymbol{\nabla} n) \tag{24.2.14}$$

Δf 在平均值点展开包含:1. $(n-\overline{n})$ 的一次项,代入式(24.2.13)对积分的贡献为零(因为假定系统总粒子数不变);2. $(n-\overline{n})$ 的二次项;3. $\boldsymbol{\nabla} n$ 的一次项,因 Δf 是标量,而 $\boldsymbol{\nabla} n$ 是矢量,故 $\boldsymbol{\nabla} n$ 的一次项前系数必须为零;4. $\boldsymbol{\nabla} n$ 的二次项 $(\boldsymbol{\nabla} n)^2$;5. 交叉项 $n\boldsymbol{\nabla}^2 n$,代入体积分(24.2.13)后,利用 Gauss 积分公式可化成对 $(\boldsymbol{\nabla} n)^2$ 的体积分. 因此展开式为

$$\Delta f = \frac{a}{2}(n - \overline{n})^2 + \frac{b}{2}(\boldsymbol{\nabla} n)^2 \tag{24.2.15}$$

在式(24.2.13)的积分体元中应用热力学定律(数学上无限小,但物理上足够大,以至于宏观热力学定律仍然适用) $\mathrm{d}f = -s\mathrm{d}T - p\mathrm{d}v + \mu \mathrm{d}N$ (其中 $N = nv$ 是体元中的粒子数). 由式(20.3.30),可以得到展开系数

$$a = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial n^2}\right)_T = \left(\frac{\partial \mu}{\partial n}\right)_T = \frac{1}{n^2}\frac{1}{\kappa_T} \tag{24.2.16}$$

平衡条件要求 $\kappa_T > 0$,故 $a > 0$,但在相变点 $\kappa_T \to \infty$,故 $a = 0$. 据此取 $a = a_0 |T - T_c|$,其中 T_c 为相变温度. 另外,因不存在涨落时,自由能 f 极小,涨落只能使自由能增加,故 $b > 0$.

另一方面,把式(24.2.5)和(24.2.6)代入方程(24.2.15)得到

$$\Delta f = \frac{1}{V^2} \sum_{k,k'} n_k^* n_{k'} \left(\frac{a}{2} + \frac{b}{2} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{k}'\right) \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}] \tag{24.2.17}$$

代入积分式(24.2.13),并注意到

$$\frac{1}{V} \int \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}] \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} = \delta_{kk'} \tag{24.2.18}$$

可得

$$\Delta F = \frac{1}{2V} \sum_k (a + bk^2) \mid n_k \mid^2 = \frac{1}{V} \sum_{k>0} (a + bk^2) \mid n_k \mid^2 \tag{24.2.19}$$

上式表明 $|n_k|^2$ 分布是统计独立的. 式中第二个等式是因为 $n_k^* = n_{-k}$,求和中包含 k 和 $-k$,实际上对 $|n_k|^2$ 求相同的二次. 代入式(24.2.12)得到 $|n_k|^2$ 的概率分布为

$$\rho_\Delta \sim \exp\left[-\frac{\beta}{V}(a + bk^2) \mid n_k \mid^2\right] \tag{24.2.20}$$

于是

$$\overline{|n_k|^2} = \frac{V}{2\beta(a+bk^2)} \tag{24.2.21}$$

因此得到关联函数为

$$g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|) = \frac{1}{2\beta V}\sum_k \frac{1}{(a+bk^2)}\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')] \tag{24.2.22}$$

上式求和变为积分

$$\sum_k \cdots = \frac{V}{(2\pi)^3}\int \cdots \mathrm{d}^3\boldsymbol{k} \tag{24.2.23}$$

于是关联函数为

$$\begin{aligned} g_{nn}(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|) &= \frac{1}{2\beta}\frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{1}{(a+bk^2)}\exp[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3\boldsymbol{k} \\ &= \frac{1}{4\pi b\beta}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{\xi}\right) \end{aligned} \tag{24.2.24}$$

其中 $\xi=\sqrt{b/a}$，称为**关联长度**. 显然当两点距离 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|<\xi$ 时，粒子数密度的涨落的关联是显著的；而当 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|>\xi$ 时，关联指数衰减.

在相变点附近 $a=a_0|T-T_c|$，故

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad \nu = 1/2 \tag{24.2.25}$$

其中 $t=(T-T_c)/T_c$. 当 $t\to 0$ 时，关联长度趋向无限，意味着整个系统的密度涨落都相互关联. 接近相变点时，关联长度趋向无限是临界现象的基本特征. 系统物理量在相变点附近的许多特性都与关联长度趋向无限有关. 例如系统的总粒子数涨落为

$$\begin{aligned} \overline{(N-\overline{N})^2} &= \iint \overline{[n(\boldsymbol{r})-\overline{n}][n(\boldsymbol{r}')-\overline{n}]}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \\ &= V\int g_{nn}(\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3\boldsymbol{R} = \frac{k_B T}{b}\xi^2 V \end{aligned} \tag{24.2.26}$$

上式说明在相变点，粒子数涨落的反常增大与关联长度趋向无限有关.

以上介绍的是 Landau 临界现象的唯象理论. 显然在十分接近相变点时，展开式(24.2.15)不成立. 实验表明

$$\xi \sim |T-T_c|^{-\nu}, \quad \nu = 0.6 \sim 0.7 \tag{24.2.27}$$

而 Landau 唯象理论给出 $\nu=0.5$. 20 世纪 70 年代发展的重正化群理论提供了从微观上计算临界指数的方法，已获得了巨大的成功.

24.3 涨落的时间关联:Brown 运动

本节介绍涨落的时间关联,也就是系统的一个物理量在某一时刻 t 的涨落对另一时刻 $t+\tau$ 的影响. 设有一个处于统计平衡的系统(注意这个条件),定义任何一个物理量 $A(t)$ 的时间相关函数为

$$\Phi_{AA}(\tau)=\langle A(t)A(t+\tau)\rangle \tag{24.3.1}$$

上式中的平均是系综平均,即对系统在 t 时刻和 $t+\tau$ 时刻的所有可能的微观状态平均. 因系统处于平衡态,上式右边的统计平均与时间 t 无关,而只与两个时刻的时间差 τ 有关. 显然系综平均应该等于时间平均,即固定 τ,在长时间内对一切可能的 A 求平均,即

$$\Phi_{AA}(\tau)=\overline{A(t)A(t+\tau)}=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T A(t)A(t+\tau)\mathrm{d}t \tag{24.3.2}$$

当 $\tau=0$ 时

$$\Phi_{AA}(0)=\langle A(t)A(t)\rangle=\langle A^2(t)\rangle \tag{24.3.3}$$

如果 $A(t)$ 的系综平均为零:$\overline{A}=\langle A(t)\rangle=0$,那么 $\Phi_{AA}(0)$ 表示 $A(t)$ 的平方涨落;当相隔足够长时间后,涨落的相关性已经很小,即

$$\Phi_{AA}(\tau)\mid_{\tau\to\infty}=\langle A(t)A(t+\tau)\rangle\mid_{\tau\to\infty}=\langle A(t)\rangle\langle A(t+\tau)\rangle=0 \tag{24.3.4}$$

因此与空间关联长度一样,存在时间关联长度 τ_c. 当 $\tau<\tau_c$ 时,相关较大,而当 $\tau>\tau_c$ 时,相关较小. 把时间的随机变量分解成不同频率成分的叠加,可以分析不同频率成分对时间关联函数的贡献. 对 $A(t)$ 作 Fourier 积分

$$A(t)=\int_{-\infty}^{\infty}a(\omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}\omega \tag{24.3.5}$$

因为 $A(t)$ 是实数,上式两边求复共轭

$$A(t)=\int_{-\infty}^{\infty}a^*(\omega)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}\omega=\int_{-\infty}^{\infty}a^*(-\omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}\omega \tag{24.3.6}$$

故 $a(\omega)=a^*(-\omega)$. 方程(24.3.5)代入式(24.3.1)得到

$$\Phi_{AA}(\tau)=\int\mathrm{d}\omega\int\mathrm{d}\omega'\langle a(\omega)a(\omega')\rangle\exp(\mathrm{i}\omega\tau)\exp[\mathrm{i}(\omega+\omega')t] \tag{24.3.7}$$

取 $\tau=0$,即

$$\Phi_{AA}(0)=\int\mathrm{d}\omega\int\mathrm{d}\omega'\langle a(\omega)a(\omega')\rangle\exp[\mathrm{i}(\omega+\omega')t] \tag{24.3.8}$$

上式左边为常数,而右边与 t 有关,利用 $a(\omega)=a^*(-\omega)$,必须

$$\langle a(\omega)a(\omega')\rangle=\langle\mid a(\omega)\mid^2\rangle\delta(\omega+\omega') \tag{24.3.9}$$

$\langle|a(\omega)|^2\rangle$ 称为随机变量 $A(t)$ 的谱密度. 由式(24.3.8)得到

$$\Phi_{AA}(0)=\langle A^2(t)\rangle=\int\langle|a(\omega)|^2\rangle\mathrm{d}\omega \tag{24.3.10}$$

上式表明了一个随机变量的平方涨落与谱密度的关系.

另一方面,相关函数 $\Phi_{AA}(\tau)$的 Fourier 谱为

$$\varphi_{AA}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_{AA}(\tau)\exp(-\mathrm{i}\omega\tau)\mathrm{d}\tau \tag{24.3.11}$$

由式(24.3.7)和(24.3.9)

$$\begin{aligned}\varphi_{AA}(\omega)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\int\langle|a(\omega'')|^2\rangle\exp(\mathrm{i}\omega''\tau)\mathrm{d}\omega''\right]\exp(-\mathrm{i}\omega\tau)\mathrm{d}\tau\\&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle|a(\omega'')|^2\rangle d\omega''\cdot\int\exp[\mathrm{i}(\omega''-\omega)\tau]\mathrm{d}\tau\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\langle|a(\omega'')|^2\rangle\delta(\omega''-\omega)\mathrm{d}\omega''=\langle|a(\omega)|^2\rangle\end{aligned}$$

即得到相关函数的谱与谱密度的关系

$$\varphi_{AA}(\omega)=\langle|a(\omega)|^2\rangle \tag{24.3.12}$$

下面把式(24.3.10)和(24.3.12)应用于 Brown 运动的讨论. 在显微镜下观察悬浮在液体中的微小颗粒(如花粉),可看到颗粒不停地进行着无规则运动. 这种运动称为 **Brown 运动**,是由于颗粒受到液体分子的不断碰撞引起的. 在某一方向颗粒的运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=-\gamma v+F(t) \tag{24.3.13}$$

式中 v 是颗粒运动速度,$F(t)$是颗粒受到液体分子碰撞的随机力,γ 是颗粒运动的阻尼系数. 因为液体分子的碰撞力是随机的,某一时刻的碰撞力与另一时刻的碰撞力无关,故随机力的相关性应该为

$$\langle F(t)F(t+\tau)\rangle=\langle F^2(t)\rangle\delta(\tau)=F_0^2\delta(\tau) \tag{24.3.14}$$

其中 F_0 为常数. 方程(24.3.13)两边作 Fourier 变换得到

$$v(\omega)=\frac{F(\omega)}{\gamma+\mathrm{i}m\omega} \tag{24.3.15}$$

因此速度相关函数的谱密度为

$$\langle|v(\omega)|^2\rangle=\frac{\langle|F(\omega)|^2\rangle}{\gamma^2+m^2\omega^2} \tag{24.3.16}$$

而由式(24.3.12)

$$\varphi_{FF}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}F_0^2\delta(\tau)\exp(-\mathrm{i}\omega\tau)\mathrm{d}\tau=\frac{F_0^2}{2\pi}=\langle|F(\omega)|^2\rangle \tag{24.3.17}$$

代入式(24.3.16)得到

$$\langle | v(\omega) |^2 \rangle = \frac{F_0^2}{2\pi(\gamma^2 + m^2\omega^2)} \tag{24.3.18}$$

因此，由(24.3.10)得到速度的平方涨落为

$$\langle v^2(t) \rangle = \int \langle | v(\omega) |^2 \rangle \mathrm{d}\omega = \frac{F_0^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{(\gamma^2 + m^2\omega^2)} = \frac{F_0^2}{2\gamma m} \tag{24.3.19}$$

另一方面，在颗粒与流体达到热平衡时，应该满足能量均分定理，即

$$\frac{1}{2} m \langle v^2(t) \rangle = \frac{1}{2} k_{\mathrm{B}} T \tag{24.3.20}$$

联合上二式得到

$$F_0^2 = 2k_{\mathrm{B}} T\gamma \tag{24.3.21}$$

显然 F_0^2 标志随机力的大小，γ 是阻尼力大小的量度，它代表一种耗散机制的强度. 上式说明耗散越强，随机力的涨落越强，这一结果称为**涨落-耗散定理**.

由式(24.3.11)的逆变换得到速度涨落的相关函数为

$$\begin{aligned}
\Phi_w(\tau) = \langle v(t)v(t+\tau) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_w(\omega) \exp(\mathrm{i}\omega\tau) \mathrm{d}\omega \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \langle | v(\omega) |^2 \rangle \exp(\mathrm{i}\omega\tau) \mathrm{d}\omega \\
&= \frac{F_0^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(\mathrm{i}\omega\tau)}{(\gamma^2 + m^2\omega^2)}) \mathrm{d}\omega \\
&= \frac{F_0^2}{2\pi} \frac{\pi}{m\gamma} \exp\left(-\frac{\gamma}{m}\tau\right) = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{m} \exp\left(-\frac{\gamma}{m}\tau\right)
\end{aligned} \tag{24.3.22}$$

可见尽管不同时刻的涨落力不存在关联，但不同时刻 Brown 粒子的速度却存在相关性. 取 $\tau=0$，得到 Brown 粒子的速度涨落为

$$\Phi_w(0) = \langle v^2(t) \rangle = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{m} \tag{24.3.23}$$

当取 $\tau \to \infty$ 时，$\Phi_w(\infty)=0$，即速度相关为零. 关联时间为 $\tau_c = m/\gamma$，显然阻尼 γ 越大，关联时间 τ_c 越短.

同样，对不同的物理量 A 和 B，可以定义它们的交叉时间关联函数

$$\Phi_{AB}(\tau) = \langle A(t)B(t+\tau) \rangle \tag{24.3.24}$$

表示 t 时刻物理量 A 的涨落与 $t+\tau$ 时刻物理量 B 的涨落之间的相关性.

例 24.3.1 L-R 电路中的热噪声.

解： 热噪声是电子在导体内的无规热运动引起的. 设电路的电感为 L，电流为 i. 导体内的离子振动对电子的散射（相当于液体分子对 Brown 颗粒的碰撞）产生一个等效电压 $v(t)$，它可分解为慢变部分 $-Ri$（R 即电阻）和涨落电压 $V(t)$，相应的方程为

$$L\frac{\mathrm{d}i}{\mathrm{d}t}=-Ri+V(t) \tag{24.3.25}$$

与方程(24.3.13)比较，相当于作代换：$L\leftrightarrow m$；$R\leftrightarrow\gamma$；$F\leftrightarrow V$，涨落电压 $V(t)$ 相当于涨落力. 涨落电压 $V(t)$ 的关联时间大体是电子在导体中的连续两次碰撞间的自由时间，在室温下是 10^{-14} s 量级，远小于无线电微波的周期. 故涨落电压 $V(t)$ 的关联可以用 δ 函数表示，即

$$\overline{V(t)V(t+\tau)}=2k_{\mathrm{B}}TR\delta(\tau) \tag{24.3.26}$$

得到上式，利用了式(24.3.21)和类比关系 $R\leftrightarrow\gamma$. 将涨落电压 $V(t)$ 作 Fourier 变换得到

$$\begin{aligned}V(t)&=\int_{-\infty}^{+\infty}V(\omega)\exp(\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}\omega\\ V(\omega)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}V(t)\exp(-\mathrm{i}\omega t)\mathrm{d}t\end{aligned} \tag{24.3.27}$$

注意到 $V(t)$ 是实数，$V^*(\omega)=V(-\omega)$，可以得到

$$\begin{aligned}\overline{V(\omega)V^*(\omega')}&=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\overline{V(t)V(t')}\exp[-\mathrm{i}(\omega'-\omega)t]\mathrm{d}t\mathrm{d}t'\\ &=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp[-\mathrm{i}(\omega'-\omega)t]\mathrm{d}t\int_{-\infty}^{+\infty}\overline{V(t)V(t+\tau)}\exp(\mathrm{i}\omega'\tau)\mathrm{d}\tau\end{aligned} \tag{24.3.28}$$

得到上式，已作变换 $t'=t+\tau$. 把式(24.3.26)代入上式得到

$$\overline{V(\omega)V^*(\omega')}=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\pi}R\delta(\omega-\omega') \tag{24.3.29}$$

上式意味着：涨落电压的不同频率分量是统计独立的，各频率电压涨落的均方值与电阻和温度成正比，而与频率无关，称为**白噪声**.

24.4　准独立粒子系统的局部细致平衡

在研究平衡态时，根据一般的原则(等概率原理和各态经历假定)就可以求得分布函数，进而求得微观量的统计平均值. 建立非平衡态统计理论则要困难得多. 宏观热现象最重要的特征是它的不可逆性，如处在非平衡态的孤立系统会自发地趋向平衡状态，而反过来是不可能的. 非平衡态统计理论要对趋向平衡的不可逆性提供统计解释，并分析平衡态得以建立的条件. 在趋向平衡的过程中会发生物质、动量和能量的输运过程. 对于偏离平衡态不远的情况，根据实验建立了输运过程的规律(如扩散定律——物质输运、热传导 Fourier 定律——能量输运和牛顿黏滞定律——动量输运). 非平衡态统计理论的首要任务是求出非平衡态的分布函数，由此可求微观量的统计平均值. 为此必须导出非平衡态分布函数所遵从的方程. 本书

不进一步展开这方面的内容,仅介绍系统由非平衡态趋向平衡态必须满足的条件,**即局部细致平衡条件**.

为了简单,考虑准独立粒子系统,讨论由于粒子-粒子之间的二元碰撞对单粒子分布$\{n_i\}$变化率的影响.设处于单粒子能级ε_i上的一个粒子与处于单粒子能级ε_m上的一个粒子发生碰撞后,一个跃迁到能级ε_k,另一个跃迁到ε_l(假定在碰撞发生过程中粒子的空间位置没有变化),单位时间的跃迁概率为A_{im}^{kl}.由于碰撞,在时间间隔Δt内能级ε_i上的粒子数n_i减少数目应该正比于:(1) 能级ε_i和ε_m的粒子数(n_i,n_m),这两个能级上的粒子越多,碰撞的机会就越大;(2) 终态能级ε_k和ε_l的状态数(即简并度)(g_k,g_l),这两个能级的状态数越多,跃迁到这两个能级的机会就越大,即

$$(\Delta n_-)_{im}^{kl}=A_{im}^{kl}n_in_mg_kg_l\Delta t \tag{24.4.1}$$

注意:上式没有考虑微观粒子的全同性.对于Fermi子,只有跃迁到能级ε_k和ε_l上没有被占据的状态,故(g_k,g_l)应减去已占据的状态,即

$$(\Delta n_-)_{im}^{kl}=A_{im}^{kl}n_in_m(g_k-n_k)(g_l-n_l)\Delta t \tag{24.4.2}$$

而对于Bose子,由于吸引相关性,能级ε_k和ε_l上的粒子越多,跃迁到能级ε_k和ε_l的概率越大,即

$$(\Delta n_-)_{im}^{kl}=A_{im}^{kl}n_in_m(g_k+n_k)(g_l+n_l)\Delta t \tag{24.4.3}$$

以上三式可统一写成

$$(\Delta n_-)_{im}^{kl}=A_{im}^{kl}n_in_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)\Delta t \tag{24.4.4}$$

γ取0,1和-1分别对应于Boltzmann统计、Bose统计和Fermi统计.能级ε_i上的粒子数n_i的减少不仅可以通过与n_m的碰撞,还可以通过与其他能级上的粒子的碰撞.同样,碰撞后也可以跃迁到其他能级,故单位时间内能级ε_i上的粒子数减少为

$$\left(\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}\right)_-=\sum_{m,k,l}A_{im}^{kl}n_in_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l) \tag{24.4.5}$$

同理,其他能级上的粒子也会通过碰撞跃迁到能级ε_i,使能级ε_i上的粒子增加,即

$$\left(\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}\right)_+=\sum_{m,k,l}A_{kl}^{im}n_kn_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m) \tag{24.4.6}$$

碰撞-跃迁概率A_{im}^{kl}与矩阵元H'^{kl}_{im}的平方成正比,由于碰撞作用算符的Hermite性质,矩阵元H'^{kl}_{im}是对称的,即$A_{im}^{kl}=A_{kl}^{im}$.于是,单位时间内能级ε_i上的粒子数净增加为

$$\frac{\mathrm{d}n_i}{\mathrm{d}t}=\sum_{m,k,l}A_{im}^{kl}[n_kn_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)-n_in_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)] \tag{24.4.7}$$

当系统达到统计平衡时,分布$\{n_i\}$不随时间变化.因此如果上式右边括号中二项相

等，那么就可以保证 $dn_i/dt=0$. 所以我们得到系统达到统计平衡的充分条件为

$$n_k n_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)=n_i n_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l) \qquad (24.4.8)$$

注意，上式仅是统计平衡的充分条件，因为求和式(24.4.7)中的每一项可正可负. 下面证明上式也是系统达到统计平衡的必要条件. 由熵的定义

$$S=k_B\ln\Omega^{F,B}(\{n_i\}) \qquad (24.4.9)$$

注意：在非平衡态，S 不必是最大值，它是任意分布 $\{n_i\}$ 的函数，而分布 $\{n_i\}$ 随时间变化. 由式(21.1.5)和(22.1.7)得到（注意到 γ 取 0，1 和 −1）

$$S=k_B\sum_i[(-\gamma g_i\ln g_i-n_i\ln n_i+(n_i+\gamma g_i)\ln(g_i+\gamma n_i)] \qquad (24.4.10)$$

于是熵的时间变化率为

$$\frac{dS}{dt}=k_B\sum_i\frac{dn_i}{dt}[-(\ln n_i+1)+\ln(g_i+\gamma n_i)+1]$$
$$=k_B\sum_i\frac{dn_i}{dt}\ln\left(\frac{g_i+\gamma n_i}{n_i}\right) \qquad (24.4.11)$$

式(24.4.7)代入上式得到

$$\frac{dS}{dt}=k_B\sum_{i,m,k,l}A_{im}^{kl}[n_k n_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)$$
$$-n_i n_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)]\ln\left(\frac{g_i+\gamma n_i}{n_i}\right) \qquad (24.4.12)$$

上式对调求和指标 $i\leftrightarrow m$，利用对称关系 $A_{im}^{kl}=A_{mi}^{kl}$ 得到

$$\frac{dS}{dt}=k_B\sum_{i,m,k,l}A_{im}^{kl}[n_k n_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)$$
$$-n_i n_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)]\ln\left(\frac{g_m+\gamma n_m}{n_m}\right) \qquad (24.4.13)$$

式(24.4.12)中再对调一对求和指标 $im\leftrightarrow kl$，利用对称关系 $A_{im}^{kl}=A_{kl}^{im}$ 得到求和

$$\frac{dS}{dt}=k_B\sum_{i,m,k,l}A_{im}^{kl}[n_i n_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)$$
$$-n_k n_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)]\ln\left(\frac{g_k+\gamma n_k}{n_k}\right) \qquad (24.4.14)$$

上式中对调 $k\leftrightarrow l$ 并且利用对称关系 $A_{im}^{kl}=A_{kl}^{im}=A_{lk}^{im}=A_{im}^{lk}$

$$\frac{dS}{dt}=k_B\sum_{i,j,k,l}A_{im}^{kl}[n_i n_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)$$
$$-n_k n_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)]\ln\left(\frac{g_l+\gamma n_l}{n_l}\right) \qquad (24.4.15)$$

把以上四个方程相加得到

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}=\frac{k_{\mathrm{B}}}{4}\sum_{i,m,k,l}A_{im}^{kl}[n_kn_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)-n_in_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)]\ln\left[\frac{n_kn_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)}{n_in_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l)}\right] \tag{24.4.16}$$

显然上式中求和项的函数形式为

$$f(x,y)=(x-y)\ln\frac{x}{y} \tag{24.4.17}$$

当 $x>y$ 时：$(x-y)>0$，$\ln(x/y)>0$；当 $x<y$ 时：$(x-y)<0$，$\ln(x/y)<0$，故恒有 $f(x,y)>0$. 因跃迁概率 $A_{im}^{kl}>0$，故式(24.4.16)中每一项都大于零，即

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}\geqslant 0 \tag{24.4.18}$$

即系统的熵总是增加，直到达到平衡状态. 等于零的必要条件为

$$n_kn_l(g_i+\gamma n_i)(g_m+\gamma n_m)=n_in_m(g_k+\gamma n_k)(g_l+\gamma n_l) \tag{24.4.19}$$

上式称为**局部细致平衡条件**，是系统达到平衡态的充要条件. 上式表明：在统计平衡时，对于任何一个能级上的粒子数，如果有某种碰撞过程使它的粒子数减少多少，必定有相反的逆碰撞过程使它同样增加，结果正反两过程的效果抵消，这个能级上的粒子数不变. 或者说，每个量子态上的平均粒子数分布不变. 因此在已达到平衡的系统，不仅在宏观上看来不变，而且从每一个细致的微观跃迁过程来看，也已经达到平衡.

对式(24.4.19)两边求对数得到

$$\ln\left(\frac{n_k}{g_k+\gamma n_k}\right)+\ln\left(\frac{n_l}{g_l+\gamma n_l}\right)=\ln\left(\frac{n_i}{g_i+\gamma n_i}\right)+\ln\left(\frac{n_m}{g_m+\gamma n_m}\right) \tag{24.4.20}$$

可见 $\ln[n_i/(g_i+\gamma n_i)]$是碰撞过程中的守恒量. 在碰撞过程中，守恒量为能量 ε_i、动量 $\boldsymbol{p}_i$ 和粒子数 n_i，$\ln[n_i/(g_i+\gamma n_i)]$应该是这些量的线性组合，可以写成

$$\ln\left(\frac{n_i}{g_i+\gamma n_i}\right)=-\alpha-\beta\varepsilon_i+\beta\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{p}_i \tag{24.4.21}$$

即

$$n_i=\frac{g_i}{\exp[\alpha+\beta(\varepsilon_i-\boldsymbol{v}_0\cdot\boldsymbol{p}_i)]-\gamma} \tag{24.4.22}$$

可以证明 $\boldsymbol{v}_0$ 是系统整体运动的速度，如取为零，那么上式即为准独立粒子系统的分布函数.

习　题　24

24.1　证明熵涨落与体积涨落的关联

$$\overline{\Delta S\Delta V} = k_B T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

(提示:利用关系

$$\Delta S = \frac{C_V}{T}\Delta T + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \Delta V$$

然后利用热力学关系)

24.2　以 Δp、ΔS 为自变量,证明涨落分布公式

$$\rho_\Delta \sim \exp\left[\frac{1}{2}\beta\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S (\Delta p)^2 - \frac{1}{2k_B C_p}(\Delta S)^2\right]$$

从而证明

$$\overline{\Delta S\Delta p} = 0;\quad \overline{(\Delta S)^2} = k_B C_p;\quad \overline{(\Delta p)^2} = -k_B T\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S$$

(提示:利用公式(24.1.12),以 p、S 为独立变量,则

$$\Delta T = \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_p \Delta S + \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S \Delta p$$

$$\Delta V = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p \Delta S + \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S \Delta p)$$

24.3　对磁介质,证明涨落分布公式

$$\rho_\Delta \sim \exp\left[-\frac{C_m}{2k_B T^2}(\Delta T)^2 - \frac{\mu_0}{2k_B T}\left(\frac{\partial H}{\partial m}\right)_T (\Delta M)^2\right]$$

并据此证明

$$\overline{(\Delta T)^2} = \frac{k_B T^2}{C_m};\quad \overline{(\Delta m)^2} = \frac{k_B T}{\mu_0}\left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_T$$

其中 H 为外磁场,M 为介质的总磁矩,$M=mV$(m 为介质的磁化强度).(提示:外界对磁介质作元功可表示为 $\mathrm{d}W=\mu_0 H\mathrm{d}M=V\mu_0 H\mathrm{d}m$)

24.4　如果把热力学基本方程表示为

$$\mathrm{d}E = \sum_i Y_i \mathrm{d}y_i$$

其中 y_i 是热力学广义坐标(S、V、N、m 等),Y_i 是相应的广义力(T、p、μ、$\mu_0 H$ 等),证明广义涨落分布公式为

$$\rho_\Delta \sim \exp\left(-\frac{1}{2k_B T}\sum_i \Delta Y_i \Delta y_i\right)$$

并据此证明

$$\overline{\Delta y_i \Delta y_j} = k_B T\left(\frac{\partial y_j}{\partial Y_i}\right)_{y_k}; \quad \overline{\Delta Y_i \Delta Y_j} = k_B T\left(\frac{\partial Y_j}{\partial y_i}\right)_{y_k}$$

$$\overline{\Delta y_i \Delta Y_j} = k_B T\left(\frac{\partial Y_j}{\partial Y_i}\right)_{y_k} = k_B T\left(\frac{\partial y_j}{\partial y_i}\right)_{y_k} = k_B T\delta_{ji}$$

24.5 考虑三维 Brown 颗粒的运动，运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}v_i}{\mathrm{d}t} = -\gamma v_i + F_i(t) \quad (i = 1,2,3)$$

涨落力满足

$$\overline{F_i(t)} = 0, \quad \overline{F_i(t)F_j(t')} = 2\gamma k_B T\delta_{ij}\delta(t-t')$$

证明速度涨落公式

$$\langle \boldsymbol{v}^2(t)\rangle = 3\frac{k_B T}{m}$$

(提示：$\langle \boldsymbol{v}^2(t)\rangle = \langle v_x^2(t)\rangle + \langle v_y^2(t)\rangle + \langle v_z^2(t)\rangle$)

附录 A　矢量运算公式

1. 三个矢量的积

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{C}\times\boldsymbol{A})=\boldsymbol{C}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{A1.1}$$

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C} \tag{A1.2}$$

2. 矢量场的微分公式

$$(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)u=\left(\sum_i A_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right)u=\boldsymbol{A}\cdot(\nabla u) \tag{A2.1}$$

$$(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{B}=\left(\sum_i A_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right)\boldsymbol{B} \tag{A2.2}$$

$$\nabla(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{B}\cdot\nabla)\boldsymbol{A}+(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}\times(\nabla\times\boldsymbol{A})+\boldsymbol{A}\times(\nabla\times\boldsymbol{B}) \tag{A2.3}$$

$$\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})=\boldsymbol{B}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{B}) \tag{A2.4}$$

$$\nabla\times(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{B}\cdot\nabla)\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{B}+(\nabla\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{A}-(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{B} \tag{A2.5}$$

$$\nabla\cdot(u\boldsymbol{A})=(\nabla u)\cdot\boldsymbol{A}+u(\nabla\cdot\boldsymbol{A}) \tag{A2.6}$$

$$\nabla\times(u\boldsymbol{A})=(\nabla u)\times\boldsymbol{A}+u(\nabla\times\boldsymbol{A}) \tag{A2.7}$$

$$\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{A})=\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})-\nabla^2\boldsymbol{A} \tag{A2.8}$$

$$\nabla\times(\nabla u)=0\text{（标量场梯度的旋度为零）} \tag{A2.9}$$

$$\nabla\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A})=0\text{（矢量场旋度的散度为零）} \tag{A2.10}$$

3. 矢量场的微分表达式

(1) 直角坐标：$\boldsymbol{A}=A_x\boldsymbol{e}_x+A_y\boldsymbol{e}_y+A_z\boldsymbol{e}_z$，$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z$

$$\nabla u=\frac{\partial u}{\partial x}\boldsymbol{e}_x+\frac{\partial u}{\partial y}\boldsymbol{e}_y+\frac{\partial u}{\partial z}\boldsymbol{e}_z \tag{A3.1}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=\frac{\partial A_x}{\partial x}+\frac{\partial A_y}{\partial y}+\frac{\partial A_z}{\partial z} \tag{A3.2}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{A}=\begin{vmatrix}\boldsymbol{e}_x & \boldsymbol{e}_y & \boldsymbol{e}_z\\ \dfrac{\partial}{\partial x} & \dfrac{\partial}{\partial y} & \dfrac{\partial}{\partial z}\\ A_x & A_y & A_z\end{vmatrix} \tag{A3.3}$$

$$\nabla^2 u=\nabla\cdot\nabla u=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \tag{A3.4a}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{A}=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\boldsymbol{A} \tag{A3.4b}$$

(2) 柱坐标:$\boldsymbol{A}=A_\rho\boldsymbol{e}_\rho+A_\varphi\boldsymbol{e}_\varphi+A_z\boldsymbol{e}_z,\boldsymbol{r}=\rho\boldsymbol{e}_\rho+z\boldsymbol{e}_z$

$$\nabla u=\frac{\partial u}{\partial\rho}\boldsymbol{e}_\rho+\frac{1}{\rho}\frac{\partial u}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\varphi+\frac{\partial u}{\partial z}\boldsymbol{e}_z \tag{A3.5}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho A_\rho)+\frac{1}{\rho}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi}+\frac{\partial A_z}{\partial z} \tag{A3.6}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{A}=\frac{1}{\rho}\begin{vmatrix}\boldsymbol{e}_\rho & \rho\boldsymbol{e}_\varphi & \boldsymbol{e}_z\\ \frac{\partial}{\partial\rho} & \frac{\partial}{\partial\varphi} & \frac{\partial}{\partial z}\\ A_\rho & \rho A_\varphi & A_z\end{vmatrix} \tag{A3.7}$$

$$\nabla^2 u=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial u}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \tag{A3.8}$$

$$(\nabla^2\boldsymbol{A})_\rho=\nabla^2 A_\rho-\frac{1}{\rho^2}A_\rho-\frac{2}{\rho^2}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi} \tag{A3.9a}$$

$$(\nabla^2\boldsymbol{A})_\varphi=\nabla^2 A_\varphi-\frac{1}{\rho^2}A_\varphi+\frac{2}{\rho^2}\frac{\partial A_\rho}{\partial\varphi^2} \tag{A3.9b}$$

$$(\nabla^2\boldsymbol{A})_z=\nabla^2 A_z \tag{A3.9c}$$

(3) 球坐标:$\boldsymbol{A}=A_r\boldsymbol{e}_r+A_\vartheta\boldsymbol{e}_\vartheta+A_\varphi\boldsymbol{e}_\varphi,\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{e}_r$

$$\nabla u=\frac{\partial u}{\partial r}\boldsymbol{e}_r+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\boldsymbol{e}_\vartheta+\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial u}{\partial\varphi}\boldsymbol{e}_\varphi \tag{A3.10}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2A_r)+\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\sin\vartheta A_\vartheta)+\frac{1}{r\sin\vartheta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi} \tag{A3.11a}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{A}=\frac{1}{r^2\sin\vartheta}\begin{vmatrix}\boldsymbol{e}_r & r\boldsymbol{e}_\vartheta & r\sin\vartheta\boldsymbol{e}_\varphi\\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial\vartheta} & \frac{\partial}{\partial\varphi}\\ A_r & rA_\vartheta & r\sin\vartheta A_\varphi\end{vmatrix} \tag{A3.11b}$$

$$\nabla^2 u=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial u}{\partial\vartheta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2} \tag{A3.12}$$

$$(\nabla^2\boldsymbol{A})_r=\nabla^2 A_r-\frac{2}{r^2}\left[A_r+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\sin\vartheta A_\vartheta)+\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi}\right] \tag{A3.13a}$$

$$(\nabla^2\boldsymbol{A})_\vartheta=\nabla^2 A_\vartheta+\frac{2}{r^2}\left(\frac{\partial A_r}{\partial\vartheta}-\frac{A_\vartheta}{2\sin^2\vartheta}-\frac{\cos\vartheta}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial A_\varphi}{\partial\varphi}\right) \tag{A3.13b}$$

$$(\nabla^2\boldsymbol{A})_\varphi=\nabla^2 A_\varphi+\frac{2}{r^2\sin\vartheta}\left(\frac{\partial A_r}{\partial\varphi}+\cot\vartheta\frac{\partial A_\vartheta}{\partial\varphi}-\frac{A_\varphi}{2\sin\vartheta}\right) \tag{A3.13c}$$

4. 矢量场积分公式

$$\int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\oint_C\boldsymbol{r}\times\mathrm{d}\boldsymbol{l};\quad \int_V\nabla u\,\mathrm{d}\tau=\oint_S u\,\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{A4.1}$$

$$\int_V (\nabla \times \boldsymbol{A}) \mathrm{d}\tau = \oint_S \mathrm{d}\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{A}; \quad \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S} \times (\nabla u) = \oint_C u \mathrm{d}\boldsymbol{l} \tag{A4.2}$$

$$\oint_S \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \int_V (\nabla \cdot \boldsymbol{A}) \mathrm{d}\tau; \quad \oint_C \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \int_S (\nabla \times \boldsymbol{A}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{A4.3}$$

$$\int_V (u \nabla^2 v + \nabla u \cdot \nabla v) \mathrm{d}\tau = \oint_S u (\nabla u) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{A4.4}$$

$$\int_V (u \nabla^2 v - v \nabla^2 u) \mathrm{d}\tau = \oint_S (u \nabla v - v \nabla u) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{A4.5}$$

附录 B　张量运算公式

1. 并矢和张量定义

两个矢量 $\boldsymbol{A}=A_1\boldsymbol{e}_1+A_2\boldsymbol{e}_2+A_3\boldsymbol{e}_3$ 和 $\boldsymbol{B}=B_1\boldsymbol{e}_1+B_2\boldsymbol{e}_2+B_3\boldsymbol{e}_3$ 的并矢或者张量

$$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{AB}=\sum_{k=1}^{3}\sum_{i=1}^{3}A_iB_k\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_k\equiv\sum_{k=1}^{3}\sum_{i=1}^{3}T_{ik}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_k \tag{B1.1}$$

张量 $\boldsymbol{T}$ 用矩阵表示为

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12} & T_{13}\\ T_{21} & T_{22} & T_{23}\\ T_{31} & T_{32} & T_{33}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}A_1B_1 & A_1B_2 & A_1B_3\\ A_2B_1 & A_2B_2 & A_2B_3\\ A_3B_1 & A_3B_2 & A_3B_3\end{bmatrix} \tag{B1.2}$$

单位张量

$$\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix} \tag{B1.3}$$

通常称标量为零阶张量;称矢量为一阶张量;称两个矢量的并矢为二阶张量;称三个矢量的并矢为三阶张量,等等.

2. 张量的运算

(1) 张量 $\boldsymbol{T}$ 与矢量 $\boldsymbol{n}$ 的点乘为矢量

$$\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}T_{11} & T_{12} & T_{13}\\ T_{21} & T_{22} & T_{23}\\ T_{31} & T_{32} & T_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}n_1\\ n_2\\ n_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}T_{11}n_1+T_{12}n_2+T_{13}n_3\\ T_{21}n_1+T_{22}n_2+T_{23}n_3\\ T_{31}n_1+T_{32}n_2+T_{33}n_3\end{bmatrix}=(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{A} \tag{B2.1}$$

或者

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}T_{11}n_1+T_{21}n_2+T_{31}n_3\\ T_{12}n_1+T_{22}n_2+T_{32}n_3\\ T_{13}n_1+T_{23}n_2+T_{33}n_3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{B} \tag{B2.2}$$

如果 $\boldsymbol{T}$ 是一个对称张量,$T_{ik}=T_{ki}$,则二者一致. 本书中涉及的张量基本上都是对称张量.

(2) 张量 $\boldsymbol{T}$ 与张量 $\boldsymbol{D}$ 的二次点乘为标量

$$\boldsymbol{T}:\boldsymbol{D}=\sum_{ij}T_{ij}D_{ji} \tag{B2.3}$$

张量 $\boldsymbol{T}$ 与单位张量的二次点乘为标量

$$\boldsymbol{T}:\boldsymbol{I}=\sum_{ij}T_{ij}\delta_{ji}=T_{11}+T_{22}+T_{33}\equiv\mathrm{tr}\boldsymbol{T} \tag{B2.4}$$

3. 梯度算子∇的张量形式

$$\nabla\nabla=\sum_{j=1}^{3}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j=\begin{bmatrix}\frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_1} & \frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_2} & \frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_3}\\ \frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_1} & \frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_2} & \frac{\partial^2}{\partial x_2\partial x_3}\\ \frac{\partial^2}{\partial x_3\partial x_1} & \frac{\partial^2}{\partial x_3\partial x_2} & \frac{\partial^2}{\partial x_3 x_3}\end{bmatrix} \tag{B3.1}$$

$$\boldsymbol{I}:\nabla\nabla=\nabla\nabla:\boldsymbol{I}=\nabla\cdot\nabla=\nabla^2. \tag{B3.2}$$

4. 张量场的微分公式

$$\nabla\cdot\boldsymbol{T}=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial T_{ji}}{\partial x_j}\boldsymbol{e}_i; \tag{B4.1}$$

$$\nabla\cdot(\nabla\cdot\boldsymbol{T})=\nabla\nabla:\boldsymbol{T}=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial T_{ji}}{\partial x_i\partial x_j} \tag{B4.2}$$

$$\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}\boldsymbol{r})=(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{r}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}\boldsymbol{A},(\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z) \tag{B4.3}$$

$$\nabla\boldsymbol{r}=\boldsymbol{I};\quad \boldsymbol{A}\cdot\nabla\boldsymbol{r}=\boldsymbol{A};\quad \nabla\cdot(\boldsymbol{A}\boldsymbol{r})=(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{r}+\boldsymbol{A} \tag{B4.4}$$

$$\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{A}\cdot\nabla)\boldsymbol{B}+(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{B};\quad \nabla\cdot(u\boldsymbol{I})=\nabla u \tag{B4.5}$$

$$\nabla\times(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})=(\nabla\times\boldsymbol{A})\boldsymbol{B}-(\boldsymbol{A}\times\nabla)\boldsymbol{B} \tag{B4.6}$$

5. 张量场的积分公式

$$\int_V\nabla\cdot\boldsymbol{T}\mathrm{d}\tau=\oint_S\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{T} \tag{B5.1}$$

$$\int_V\nabla\times\boldsymbol{T}\mathrm{d}\tau=\oint_S\mathrm{d}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{T} \tag{B5.2}$$

$$\int_V\nabla\boldsymbol{A}\mathrm{d}\tau=\oint_S\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{S} \tag{B5.3}$$

附录C　重要物理常量

物理常量	符　号	最佳实验值	供计算用值
真空中光速	c	$299792458 \pm 1.2 \mathrm{m \cdot s^{-1}}$	$3.00 \times 10^{8} \mathrm{m \cdot s^{-1}}$
引力常量	G	$(6.6720 \pm 0.0041) \times 10^{-11} \mathrm{m^3 \cdot s^{-2}}$	$6.67 \times 10^{-11} \mathrm{m^3 \cdot s^{-2}}$
阿伏加德罗(Avogadro)常量	N_A	$(6.022045 \pm 0.000031) \times 10^{23} \mathrm{mol^{-1}}$	$6.02 \times 10^{23} \mathrm{mol^{-1}}$
玻尔兹曼(Boltzmann)常量	k_B	$(1.380662 \pm 0.000041) \times 10^{-23} \mathrm{J \cdot K^{-1}}$	$1.38 \times 10^{-23} \mathrm{J \cdot K^{-1}}$
基本电荷	e	$(1.6021892 \pm 0.0000046) \times 10^{-19} \mathrm{C}$	$1.602 \times 10^{-19} \mathrm{C}$
电子静止质量	m_e	$(9.109534 \pm 0.000047) \times 10^{-31} \mathrm{kg}$	$9.11 \times 10^{-31} \mathrm{kg}$
真空电容率	ε_0	$(8.854187818 \pm 0.000000071) \times 10^{-12} \mathrm{F \cdot m^{-2}}$	$8.85 \times 10^{-12} \mathrm{F \cdot m^{-2}}$
真空磁导率	μ_0	$12.5663706144 \pm 10^{-7} \mathrm{H \cdot m^{-1}}$	$4\pi \mathrm{H \cdot m^{-1}}$
普朗克(Planck)常量	h	$(6.626176 \pm 0.000036) \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot s}$	$6.63 \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot s}$

附录 D　英汉人名对照表

（按英文字母排序）

Avogadro　阿伏伽德罗
Bessel　贝塞尔
Bloch　布洛赫
Bohr　波尔
Boltzmann　玻尔兹曼
Born　玻恩
Bose　玻色
Brewster　布儒斯特
Brown　布朗
Carnot　卡诺
Christoffel　克里斯托费尔
Compton　康普顿
Coulomb　库仑
Davison　戴维森
de Broglie　德布罗意
Debye　德拜
Dirac　狄拉克
d'Alembert　达朗贝尔
Einstein　爱因斯坦
Euler　欧拉
Faraday　法拉第
Fermi　费米
Fock　福克
Fourier　傅里叶
Galileo　伽利略
Gauss　高斯
Germer　革末
Green　格林
Hamilton　哈密顿
Hankel　汉克尔
Hartree　哈特里
Helmholtz　亥姆霍兹
Hermite　厄米
Hilbert　希尔伯特
Hooke　胡克
Jacobi　雅可比
Jones　琼斯
Lagrange　拉格朗日
Laguerre　拉盖尔
Lamb　兰姆
Lamé　拉密
Landau　朗道
Laplace　拉普拉斯
Larmor　拉莫尔
Legendre　勒让德
Liouville　刘维尔
Lippman　李普曼
Lorentz　洛伦兹
Maxwell　麦克斯韦
Michelson　迈克耳孙

Minkowski　闵可夫斯基
Morley　莫雷
Navier　纳维
Newton　牛顿
Pauli　泡利
Planck　普朗克
Poïsson　泊松
Rayleigh　瑞利
Reynolds　雷诺
Rutherford　卢瑟福
Schmidt　施密特
Scholte　席尔特
Schrödinger　薛定谔
Schwartz　施瓦兹
Snell　斯涅耳
Stirling　斯特林
Stokes　斯托克斯
Stonely　斯通利
Sturm　斯图姆
Taylor　泰勒
Young　杨

(O-2683.0101)



销售分类建议：高等物理

定 价：68.00 元